

TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI
FAKULTA STROJNÍ

HABILITAČNÍ PRÁCE

**Nové metodické postupy získávání vstupních dat pro
numerické simulace svařování a tepelného zpracování u
materiálů využívaných v energetickém průmyslu**

**Nové metodické postupy získávání vstupních dat pro
numerické simulace svařování a tepelného zpracování u
materiálů využívaných v energetickém průmyslu**

TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI

FAKULTA STROJNÍ

Katedra strojírenské technologie
Oddělení tváření kovů a plastů

**Nové metodické postupy získávání vstupních dat pro
numerické simulace svařování a tepelného zpracování u
materiálů využívaných v energetickém průmyslu**

**Nové metodické postupy získávání vstupních dat pro
numerické simulace svařování a tepelného zpracování u
materiálů využívaných v energetickém průmyslu**

HABILITAČNÍ PRÁCE

Ing. Jaromír Moravec, Ph.D.

Rozsah práce a příloh:

| | |
|----------------|-----|
| Počet stran: | 201 |
| Počet obrázků: | 103 |
| Počet tabulek: | 71 |
| Počet vzorců: | 68 |
| Počet příloh: | 92 |

Anotace

Předložená habilitační práce je zaměřena do oblasti návrhu, realizace a následné verifikace nových metodických postupů, vedoucích k získání relevantních vstupních dat pro numerické simulace svařování a tepelného zpracování. Je soustředěna především na materiály využívané v energetickém průmyslu, ale navržené a ověřené metodické postupy je možné aplikovat i na další typy materiálů a technologických postupů. Hlavním cílem práce bylo poskytnout uživatelům komerčních simulačních programů možnost pochopit základní principy v oblasti získávání vstupních a verifikačních dat, využít je při definování řešených úloh a následně tyto výsledky aplikovat.

Oblast numerických simulací svařování a tepelného zpracování je velice široká a není možné ji z hlediska metodických postupů řešit komplexně jako jeden celek. Proto byla experimentální část práce zaměřena především do oblasti simulací růstu zrna, do oblasti získávání vstupních a verifikačních dat pro simulace svařování s předeřevem a bez předeřevu při jednoznačném definování okrajových podmínek a do oblasti simulací tepelného zpracování zaměřené na popis dějů probíhajících na rozhraní zkušební vzorek – ochlazovací médium. Pro potvrzení vhodnosti navržených metodických postupů byly realizovány verifikační experimenty na celkem osmi různých materiálech využívaných v energetickém průmyslu. Tyto materiály byly vybrány tak, aby byly zastoupeny všechny metalurgické struktury. Jednalo se tak o austenitické oceli 25Cr20NiNbN (HR3C), 18Cr9Ni3CuNbN (S304H) a 18Cr12NiNb (TP347HFG), martenzitické oceli X22CrMoV12-1 a X10CrWMoVNb9-2 (P92), bainitické oceli 7CrMoVTi10-10 (P24) a 10GN2MFA a feriticko perlitickou ocel P235GH.

Pro ucelený pohled na složitost uvedené problematiky byly v teoretické části popsány všechny typy vstupních dat, nezbytných pro numerické simulace svařování a tepelného zpracování využívané v komerčních simulačních programech. Kromě základního popisu způsobu jejich získávání byly v této stati popsány také modely využívané k vlastním numerickým simulacím. Snahou bylo také ukázat, že se nelze spoléhat pouze na programové databáze a využívat je bez znalosti jakýchkoliv okrajových podmínek simulovaného procesu a že nelze získané výsledky přijímat jako axiom bez dalšího experimentálního ověření a interpretace výsledných dějů.

Anotace AJ:

Poděkování:

Rád bych zde poděkoval kolegům z Technické univerzity v Liberci a kolegům z firmy Mecas ESI, s.r.o., kteří se se mnou, v rámci grantových projektů, podíleli na realizaci experimentálních měření a na realizaci numerických simulací využitých v této práci.

Dále bych rád jmenovitě poděkoval doc. Ing. Heinzi Neumannovi, CSc. a Ing. Marku Slováčkovi, Ph.D. za cenné rady, postřehy, připomínky a dlouhé diskuze, které podstatně ovlivnily směřování této habilitační práce. Také bych rád poděkoval prof. Ing. Ivě Nové, CSc., za připomínky, které pomohly tuto práci finalizovat.

Největší poděkování ale patří mé ženě Zuzaně a vlastně celé rodině za podporu, pochopení a shovívavost, již bylo potřeba v hojné míře při realizaci této práce.

Obsah

Seznam použitých zkratk a symbolů

| | | |
|-----------|---|----|
| 1. | Úvod | 11 |
| 2. | Současný stav poznání v oblasti numerických simulací svařování | 13 |
| 3. | Problematika vstupních a verifikačních dat numerických simulací | 19 |
| 3.1. | Materiálová vstupní data | 20 |
| 3.1.1. | Materiálová data pro výpočet teplotních polí | 21 |
| 3.1.2. | Materiálová data sloužící k predikci tvrdosti struktury a fázových transformací | 28 |
| 3.1.3. | Materiálová data pro výpočet napěťových a deformačních polí | 32 |
| 3.2. | Data sloužící k definici a popisu tvaru tepelného zdroje | 35 |
| 3.2.1. | 3D zdroj s Gaussovým rozložením tepla | 36 |
| 3.2.2. | Dvouelipsoidní model zdroje tepla | 37 |
| 3.3. | Technologická data sloužící k definování okrajových podmínek | 39 |
| 3.4. | Data pro definování prostorového modelu | 39 |
| 4. | Materiály využívané v energetickém průmyslu | 43 |
| 4.1. | Oceli pro energetické strojírenství | 44 |
| 4.2. | Porovnání žárovevných ocelí | 46 |
| 4.3. | Svařitelnost ocelí pro energetické strojírenství | 48 |
| 5. | Cíle habilitační práce | 54 |
| 6. | Vlastnosti a popis materiálů použitých pro experimentální měření | 55 |
| 6.1. | Austenitická vysokolegovaná ocel 25Cr20NiNbN (HR3C) | 55 |
| 6.2. | Austenitická vysokolegovaná ocel 18Cr9Ni3CuNbN (S304H) | 56 |
| 6.3. | Austenitická vysokolegovaná ocel 18Cr12NiNb (TP347HFG) | 57 |
| 6.4. | Martenzitická vysokolegovaná ocel ASTM A705-typ 630 | 58 |
| 6.5. | Martenzitická vysokolegovaná ocel X10CrWMoVNb9-2 (P92) | 59 |
| 6.6. | Martenzitická vysokolegovaná ocel X22CrMoV12-1 | 60 |
| 6.7. | Bainitická nízkolegovaná ocel 7CrMoVTi10-10 (P/T24) | 61 |
| 6.8. | Bainitická nízkolegovaná ocel 10GN2MFA | 63 |
| 6.9. | Feriticko perlitická C-Mn ocel P235GH | 64 |
| 7. | Numerické simulace velikosti austenitického zrna v TOO svarů | 66 |
| 7.1. | Popis metody Monte Carlo Potts (MCP) | 68 |
| 7.1.1. | Příprava simulace s využitím metody MCP | 69 |
| 7.2. | Způsob výpočtu velikosti zrna v komerčně využívaných programech | 70 |
| 7.3. | Vstupní data pro simulace růstu zrna a stanovení kinetiky jejich růstu | 71 |
| 7.3.1. | Plán experimentů, vzorky pro stanovení velikosti austenitického zrna | 72 |
| 7.3.2. | Příprava vzorků pro vyhodnocení velikosti austenitického zrna | 74 |
| 7.3.3. | Možné způsoby vyhodnocení velikosti austenitického zrna | 76 |
| 7.3.4. | Způsob stanovení hodnot aktivační energie Q a konstanty úměrnosti K | 82 |
| 7.3.5. | Vliv množství vstupních údajů na výslednou hodnotu konstanty úměrnosti K | 92 |

| | | |
|------------|---|------------|
| 7.3.6. | Stanovení hodnot Q , K_0 a konstanty úměrnosti K pro ostatní materiály | 95 |
| 7.4. | Simulace zhrubnutí zrna a jejich verifikace | 99 |
| 7.5. | Diskuze dosažených výsledků při simulacích velikosti austenitického zrna | 106 |
| 8. | Metodické postupy využitelné při návrhu a realizaci experimentů svařování s jasně definovanými okrajovými podmínkami | 110 |
| 8.1. | Postup návrhu a realizace experimentu při svařování bez předehřevu | 111 |
| 8.1.1. | Návrh a konstrukční řešení přípravku pro svařování s přesně definovanými podmínkami pro sdílení tepla | 111 |
| 8.1.2. | Stanovení součinitele přestupu tepla do okolí pro vytvořený přípravek | 115 |
| 8.1.3. | Příprava experimentu, definování okrajových podmínek a vstupních dat | 117 |
| 8.1.4. | Realizace experimentu a monitorizace procesních veličin | 122 |
| 8.1.5. | Geometrické vyhodnocení jednotlivých housenek | 125 |
| 8.1.6. | Výsledky měření teplotních a deformačních průběhů | 127 |
| 8.1.7. | Data pro ověření predikovaných hodnot tvrdosti | 130 |
| 8.1.8. | Definování a verifikace výpočetního modelu | 134 |
| 8.2. | Definování a verifikace výpočetního modelu při svařování s předehřevem | 141 |
| 8.2.1. | Příprava experimentu, tvar vzorku, definování okrajových podmínek | 142 |
| 8.2.2. | Realizace experimentu svařování materiálu 10GN2MFA s předehřevem | 145 |
| 8.2.3. | Geometrické vyhodnocení jednotlivých housenek na vzorku z 10GN2MFA | 150 |
| 8.2.4. | Realizace experimentu svařování materiálu X22CrMoV12-1 s předehřevem | 152 |
| 8.2.5. | Geometrické vyhodnocení jednotlivých housenek na vzorku z X22CrMoV12-1 | 156 |
| 8.2.6. | Data pro ověření predikovaných hodnot tvrdosti | 156 |
| 8.2.7. | Definování a verifikace výpočetního modelu pro svařování s předehřevem | 159 |
| 8.2.8. | Definování a verifikace nových vzorců pro výpočet tvrdosti | 163 |
| 8.3. | Diskuze dosažených výsledků při simulacích svařování | 169 |
| 9. | Metodické postupy využitelné při návrhu a realizaci experimentů | 172 |
| 9.1. | Zjednodušené způsoby volby vhodné ochlazovací rychlosti | 172 |
| 9.2. | Cíle navrženého metodického postupu | 174 |
| 9.2.1. | Podstata Jominyho zkoušky prokalitelnosti | 175 |
| 9.2.2. | Podstata Quench testu | 176 |
| 9.3. | Podstata nově navržené metodiky testování | 177 |
| 9.3.1. | Vliv velikosti a tvaru zpracovávaného dílu | 178 |
| 9.3.2. | Způsob experimentálního provedení zkoušky | 180 |
| 9.3.3. | Vyhodnocení experimentálně dosažených výsledků | 182 |
| 9.4. | Porovnání výsledků měření ochlazovací schopnosti média různými postupy | 186 |
| 9.5. | Diskuze dosažených výsledků | 189 |
| 10. | Závěr | 192 |
| 11. | Seznam použité literatury | 196 |
| | Přílohy | 206 |

Seznam použitých zkratk a symbolů

| | | |
|--------------------|---|---|
| T | - termodynamická teplota | [K] |
| T_m | - teplota média | [K] |
| T_{kal} | - kalící teplota | [K] |
| $T_{x,1}$ | - teplota v čase t_1 a v místě x | [K] |
| T_s | - teplota objektu | [K] |
| ΔT | - teplotní rozdíl (teplotní spád) | [K] |
| T_{MS} | - teplota startu martensitické transformace <i>KM</i> | [K] |
| T_p | - teplota přehřevu | [K] |
| α^* | - koeficient objemové roztažnosti | [K ⁻¹] |
| Q | - teplo | [J] |
| c | - měrná tepelná kapacita | [J·kg ⁻¹ ·K ⁻¹] |
| \bar{c} | - měrné teplo pro teplotní interval $(T_{kal} - T_m)$ | [J·kg ⁻¹ ·K ⁻¹] |
| c_p | - měrná tepelná kapacita při stálém tlaku | [J·kg ⁻¹ ·K ⁻¹] |
| $c_{T_{k,1}}$ | - měrné teplo pro teplotu v čase t_1 a v místě k | [J·kg ⁻¹ ·K ⁻¹] |
| c_m | - měrné teplo pro teplotu T_m | [J·kg ⁻¹ ·K ⁻¹] |
| C | - tepelná kapacita | [J·K ⁻¹] |
| C_p | - tepelná kapacita za konstantního tlaku | [J·K ⁻¹] |
| C_v | - tepelná kapacita za konstantní teploty | [J·K ⁻¹] |
| $C_{PX(PY)}$ | - tepelná kapacita složky ve slitině | [J·K ⁻¹] |
| Q | - aktivační energie růstu zrna | [kJ·mol ⁻¹] |
| $q(x,y,\xi)$ | - rozložení hustoty tepelného toku do materiálu | [W·m ⁻³] |
| Q_0 | - hustota tepelného toku | [W·m ⁻³] |
| q_o | - tepelný výkon vnitřních zdrojů | [W] |
| Q | - celkový výkon zdroje | [W] |
| n | - transformační parameter | [W] |
| λ_m | - tepelná vodivost mřížky | [W·m ⁻¹ ·K ⁻¹] |
| λ_e | - tepelná vodivost elektronů | [W·m ⁻¹ ·K ⁻¹] |
| λ | - součinitel tepelné vodivosti | [W·m ⁻¹ ·K ⁻¹] |
| α | - součinitel přestupu tepla (do okolí) | [W·m ⁻² ·K ⁻¹] |
| $\alpha_{T_{0,1}}$ | - součinitel přestupu tepla pro teplotu $T_{0,1}$ | [W·m ⁻² ·K ⁻¹] |
| m | - hmotnost | [kg] |

| | | |
|------------------|---|-------------------------------------|
| ρ | - hustota, | [kg·m ⁻³] |
| t | - čas, | [s] |
| t_R | - čas zpoždění | [s] |
| V | - objem tělesa | [m ³] |
| S | - plocha (plocha odvádějící teplo) | [m ²] |
| l_0 | - charakteristický rozměr objektu | [m] |
| L | - celková délka zkušebního tělesa | [m] |
| h_x | - velikost elementu tělesa | [m] |
| ξ | - poloha zdroje v závislosti na době svařování | [m] |
| r_e, r_i | - parametry definující poloměry 3D Gaussianu | [m] |
| z_e, z_i | - parametry určující délku kužele 3D Gaussianu | [m] |
| a, b, c_1, c_2 | - parametry natavené oblasti definující zdroj tepla | [m] |
| x, y, z | - souřadnice bodů, osově koordináty | [m] |
| ω | - rychlost média | [m·s ⁻¹] |
| v | - rychlost svařování | [m·s ⁻¹] |
| ν | - kinematická viskozita | [m ² ·s] |
| α | - součinitel teplotní vodivosti | [m ² ·s ⁻¹] |
| K_T | - konstanta pro výpočet velikosti zrna při dané teplotě | [m ² ·s ⁻¹] |
| K_0 | - celková konstanta pro výpočet velikosti zrna | [m ² ·s ⁻¹] |
| K | - konstanta úměrnosti pro stanovení kinetiky růstu zrna | [m ² ·s ⁻¹] |
| $A_{střední}$ | - střední plocha zrna | [mm ²] |
| A | - vzdálenost kontaktní špičky od místa svařování | [mm] |
| $D_{střední}$ | - střední velikost zrna | [mm] |
| R_{krit} | - mezní rozměr zrna vyjádřený kritickým poloměrem zrna | [mm] |
| r | - střední poloměr částic bránících pohybu hranic zrn | [mm] |
| d | - průměr tavící se elektrody u svařování MAG | [mm] |
| D | - aktuální velikost zrna | [mm] |
| D_0 | - počáteční velikost zrna | [mm] |
| σ_0 | - napětí při němž dochází k pohybu dislokací | [Pa] |
| D_E | - tenzor čtvrtého řádu daný Youngovými moduly pružnosti | [Pa] |
| E | - Youngův modul pružnosti | [Pa] |
| R_e | - mez kluzu materiálu při dané teplotě | [Pa] |

| | | |
|--------------------|---|-------------------------|
| R_m | - mez pevnosti materiálu při dané teplotě | [MPa] |
| R_{ms} | - skutečná mez pevnosti materiálu při dané teplotě | [MPa] |
| H | - hodnota deformačního zpevnění materiálu | [MPa] |
| v_r | - rychlost ochlazování | [°C·s ⁻¹] |
| η | - dynamická viskozita, | [N·m ² ·s] |
| U | - svařovací napětí | [V] |
| I | - svařovací proud | [A] |
| C_E | - uhlíkový ekvivalent vypočítaný dle EN 1011-2 (metoda A) | [%] |
| C_{ET} | - uhlíkový ekvivalent vypočítaný dle EN 1011-2 (metoda B) | [%] |
| HD | - obsah difúzního vodíku | [ml·g ⁻¹] |
| Θ | - úhel dezorientace | [rad] |
| f | - objemový podíl těchto částic bránících pohybu hranic zrn | [-] |
| η | - účinnost přenosu tepla od zdroje | [-] |
| f_1, f_2 | - konstanty ovlivňující rozložení intenzity toku energie do materiálu | [-] |
| P | - příslušný podíl zjišťované fáze | [-] |
| \overline{P} | - podíl zjišťované fáze v rovnovážném stavu | [-] |
| R^2 | - koeficient determinace | [-] |
| KM | - Koistinen-Marburgerův koeficient | [-] |
| k, l, m | - koeficienty umožňující modifikaci tvaru zdroje tepla | [-] |
| Nu | - číslo Nusseltovo | [-] |
| Re | - číslo Reynoldsovo | [-] |
| Pr | - číslo Prandtlovo | [-] |
| Gr | - číslo Grashoffovo | [-] |
| G | - číslo velikosti zrna dle EN ISO 643 | [-] |
| \overline{N}_L | - průměrný počet úseků zachycený na milimetr měřicí čáry | [-] |
| μ | - Poissonova konstanta | [-] |
| \mathcal{E}_{eq} | - ekvivalentní deformace | [-] |

1. Úvod

Dnešní doba je charakteristická neustále se zvyšujícími požadavky na kvalitu, užité vlastnosti, efektivitu a ekonomičnost výsledných výrobků. Těchto cílů lze dosáhnout jednak aplikací nových nebo inovovaných technologií, nebo použitím vývojových materiálů se specifickými vlastnostmi. Využitelnost takovýchto materiálů je především v oblasti letectví a kosmonautiky, ve zbrojním průmyslu, ale také v oblasti energetických zařízení (tepelných i jaderných), případně v těžebním, chemickém či petrochemickém průmyslu. Skupina těchto Hi-Tech materiálů je velice široká a zahrnuje v sobě jak středně a vysoce legované oceli, tak i neželezné kovy a jejich slitiny nebo například intermetalické sloučeniny.

Všechny tyto materiály ale mají jedno společné a tím jsou zvýšené nároky na kontrolu procesu při jejich spojování a zpracování a také vyšší výrobní a nákupní cena. Velké nároky na kvalitu spojů vedou zároveň k většímu počtu experimentálních kontrolních svarů, které jsou provedeny před samotným svařováním skutečných celků. Uvedené experimenty slouží například k potvrzení vhodnosti vybrané technologie svařování, základního a přídavného materiálu, typu ochranného plynu nebo tavidla, případně teploty předehřevu, dohřevu, nebo interpass teploty. Souhrnně řečeno, jsou použity k ověření postupu svařování (WPS). Zároveň ale také výrazně prodražují především předvýrobní testovací fázi a náročné jsou i časově [1]. Z uvedených důvodů začaly být pro zmíněné materiály mnohem častěji využívány numerické simulace svařování a tepelného zpracování, zejména u rozměrných dílů s vysokou tuhostí. Tyto simulace přitom nacházejí stále širší uplatnění nejen ve fázi vývojových studií, ale i v průběhu přípravy výroby, při vlastní výrobě nebo při následných opravách a renovacích.

Výsledky numerických výpočtů ale není možné chápat jako dogma a použít je bez jakýchkoliv vysvětlujících souvztažností a následného potvrzení verifikačními experimenty. Získané výsledky by proto měly být chápány spíše jako vodítko vedoucí k pochopení procesů probíhajících ve svaru a jeho blízkém okolí, včetně všech doprovodných reakcí na teplotní zatížení. Pro věrohodnost simulačních výpočtů je totiž rozhodující, do jaké míry je schopen příslušný simulační program obsáhnout teoreticky popsané fyzikální zákonitosti simulovaných dějů. Cílem je totiž při takovém ději definovat a popsat potenciální „kritická“ místa a tato místa eliminovat změnami technologického postupu, konstrukčního řešení nebo materiálu.

Svařování je navíc specifické v tom, že jde o děj, probíhající ve velmi krátkém časovém intervalu, s malou natavenou oblastí a s nelineárními závislostmi, proto je popis tohoto děje velmi obtížný. Zjednodušeně se dá říci, že velmi malá dílčí část konstrukce (svar) ovlivňuje podstatným způsobem výsledné vlastnosti celku.

Jak již bylo řečeno, výsledky simulací by měly sloužit k lepšímu porozumění simulovaného děje. K tomu je ale nejprve třeba získat jeho popis. Čím podrobněji a přesněji je daný děj

popsán, tím lépe je možné předvídat jeho chování a predikovat děje následné. Tato teze platí obecně a je možné ji cíleně použít pro jakoukoliv část lidské činnosti. Popis děje totiž usnadňuje jeho pochopení a využití. Aby však bylo možné předpokládat reakci určitého děje na různé vnější podněty, je třeba sestavit matematickou posloupnost podmínek, které na základě zadávaných numerických vstupních dat stanoví s určitou přesností předpokládaný výsledek. Čím přesněji jsou okrajové podmínky popsány a čím je větší množství a kvalita vstupních dat, tím větší je pravděpodobnost, že očekávaný výsledek bude odpovídat skutečnému stavu. [2]

V následujících kapitolách budou naznačeny aplikační možnosti komerčně využívaných numerických simulací svařování a tepelného zpracování, ale také úskalí s interpretací výsledků získaných pomocí těchto simulací. Hlavním cílem předložené práce je však ukázat, jakým způsobem by měly být koncipovány a realizovány experimenty vedoucí k získávání materiálových a technologických vstupních dat numerických simulací při přesně definovaných okrajových podmínkách a experimenty sloužící k potvrzení vhodnosti zvoleného výpočetního modelu. Práce je zaměřena na středně a vysoce legované oceli využívané v energetickém průmyslu. Důvodem je absence spolehlivých modelů chování materiálů pro tyto oceli, predikujících s dostatečnou přesností odezvu na teplotně-napěťové zatěžování při svařování a tepelném zpracování.

Protože je oblast numerických simulací svařování velice široká a není možné ji v zamýšleném zaměření zcela obsáhnout, je práce zaměřena do tří základních oblastí popsaných jednotlivými hlavními kapitolami. První z nich se věnuje simulacím změn velikosti austenitického zrna a kinetice růstu těchto zrn. Velikost zrna má totiž značný vliv na mechanické vlastnosti materiálu, ale také například na fázové transformace. V kapitole 7 budou popsány experimenty umožňující definovat velikost austenitického zrna za různých teplotních podmínek, ale také postupy zpracování získaných výsledků s cílem definovat vstupní parametry použitého výpočetního modelu. Druhá oblast je zaměřena na simulace svařování martenzitických a bainitických ocelí s cílem optimalizovat výpočetní modely pro stanovení struktur a predikci tvrdosti materiálu v průběhu svařování. Na vícevrstvých svarech bude ukázáno, jakým způsobem je nutné koncipovat experimenty a jaká metodika je vhodná k jednoznačnému stanovení okrajových podmínek. Poslední oblast pak popisuje nově vytvořenou metodiku určenou k získávání vstupních dat simulací tepelného zpracování u rozměrných dílů. Tato metodika je určena k definování okrajových podmínek a součinitele přestupu tepla na rozhraní materiál – ochlazovací médium.

Údaje a výsledky použité v této práci vznikaly v období let 2009 až 2015 a jsou výsledkem výzkumu provedeného v rámci řešení dvou grantových projektů, u nichž byl autor řešitelem. Dále jde o výsledky smluvního výzkumu prováděného autorem pro průmyslové partnery, zejména pro firmu Mecas ESI, s.r.o a pro firmu Siemens Turbomachinery, s.r.o.

2. Současný stav poznání v oblasti numerických simulací svařování

Slova jako simulace, simulační výpočet nebo numerické řešení je možné v České republice slyšet již více než dvě desítky let jak v oblasti technické a technologické, tak i v oblasti přírodních věd. Během této doby nastal velký pokrok v oblastech hardwarového i softwarového vybavení. Mnoho technologií se dnes může pochlubit téměř komplexní možností numerických řešení, uplatňujících se od přípravné fáze výroby, přes fázi stanovení technologických a výrobních podmínek, až k celkové optimalizaci procesu výroby, či stanovení provozních podmínek výrobku. V posledních letech se vývoj v oblasti simulačních výpočtů procesních technologií zaměřuje na pokročilé, tzv. simulační výpočty druhé generace. Jde v podstatě o unikátní možnost simulace posloupnosti vzniku finálního výrobku při použití různých typů technologií. Tímto způsobem je možné simulovat celou historii výroby a provozu zařízení s ohledem na limitní stavy konstrukcí i materiálů [2]. Takovéto přístupy se uplatňují především v automobilovém průmyslu a jako příklad z této oblasti lze uvést spojení technologií plošného tváření, bodového svařování a následných nárazových (crash) testů.

U technologií tavného svařování však, i přes poměrně dlouhý a intenzivní vývoj, nebylo takto komplexního řešení v rámci jednoho simulačního programu dosaženo. Důvodem je značná složitost popisu a nelinearita dějů, probíhajících ve svarovém kovu a blízkém okolí (TOO), závisející jak na typu materiálu, tak na druhu použité technologie. U tohoto typu simulací je nutné veškerá materiálová vstupní data zadávat ve formě teplotních závislostí. V případě uvažování fázových transformací je třeba tato data ve formě teplotních závislostí získat i pro každou z uvažovaných a počítaných metalurgických fází zvlášť.

V současné době v oblasti numerických simulací svařování (především tavného) a tepelného zpracování existují dva základní pohledy na to, jak danou problematiku řešit. První pohled spočívá v detailním, ale pouze dílčím řešení vybraných vlivů procesu na tvar a rozměry svarové lázně, na probíhající metalurgické pochody případně na děje probíhající v TOO. Je zde snaha o co nejpresnější popis geometrie svaru, rozložení teplot a směru proudění ve svarové lázni, nebo o strukturní analýzy svarového kovu a TOO. Výsledkem je vždy detailní popis výsledku a postupu řešení, bohužel ale pouze pro jednotlivé uvažované a zkoumané veličiny.

Druhý přístup je naopak založen na komplexním řešení celé soustavy svarový kov – tepelně ovlivněná oblast – základní materiál pro kompletní díly a výrobní celky, ovšem se zahrnutím a uvažováním řady zjednodušujících předpokladů snižujících výslednou přesnost výpočtu. Při takto pojatém řešení pak nejde o to co nejlépe popsat a pochopit probíhající děj, ale získat odezvu tohoto děje na konkrétně řešený díl. Příkladem může být stanovení celkové velikosti deformací nebo hodnoty vnitřních napětí po svaření velkých příhradových

konstrukcí, predikce tvrdosti a hodnoty vnitřních napětí u rozměrných tepelně zpracovávaných dílů, atd.

Zatímco první přístup je využíván především v rámci výzkumu a vývoje v dané oblasti, druhý přístup je preferován výrobními firmami a zástupci průmyslu, protože snáze a rychleji dokáže odpovědět na jejich otázky („jak se konstrukce zdeformuje“ nebo „vydrží díl předpokládané namáhání?“).

Přestože to není na první pohled zcela zřejmé, výsledky detailních dílčích řešení jsou velice důležité a přínosné i pro komplexní průmyslové simulace. Je zde totiž snaha o jejich začlenění do komplexních analýz, třeba i ve zjednodušené podobě. Díky tomu může dojít ke zpřesňování stávajících výpočetních modelů a to buď konkrétní změnou jejich matematického popisu nebo definováním vhodnosti použití pro určitý typ nebo skupinu materiálů. Toto začleňování však mnohdy provázejí problémy, především z důvodu velkého množství vstupních údajů dílčích analýz, ale někdy také z důvodu přílišné složitosti použitého popisu. Výsledkem jsou pak neúměrně dlouhé výpočetní časy takto prováděných analýz.

Na základě provedené rešerše je možné konstatovat, že převážná většina současného výzkumu v oblasti numerických simulací svařování je zaměřena do první oblasti a spočívá v detailním řešení dílčích vlivů procesu svařování. Tento výzkum lze rozdělit do sedmi základních oblastí na:

- 1) Simulace dějů probíhajících ve svarové lázni, na rozhraní tavenina – elektrický oblouk a v elektrickém oblouku.
- 2) Simulace dějů probíhajících v tepelně ovlivněné oblasti (fázové transformace, růst austenitického zrna atd.).
- 3) Simulace mikrostrukturních a mechanických vlastností svarových spojů.
- 4) Výpočet zbytkových napětí a deformací.
- 5) Predikce vzniku a šíření trhliny a výpočty únavové životnosti svarových spojů.
- 6) Modelování speciálních způsobů a metod spojování materiálů.
- 7) Výpočetní programy a simulační nástroje.

Jevy probíhající ve svarové lázni, patří mezi nejčastěji simulované děje a týkají se především výpočtů způsobu přestupu tepla a proudění taveniny ve svarové lázni [3,4,5,6] a predikce geometrie svarové lázně [2,3,7,8]. Tyto studie a jejich experimentální ověření jsou většinou zaměřeny na slitiny hliníku a slitiny titanu, HSLA oceli, nebo austenitické oceli využívané v energetice (např. 316L, S304H, HR3C, TP347HFG atd.). Uvedené studie se ale mohou provádět například i pro intermetalické materiály, mezi něž patří například aluminidy titanu γ -TiAl [9,11], nebo aluminidy železa Fe_3Al [1,10]. Velmi významná část jevů probíhajících ve svarové lázni je zaměřena na simulace vlivu povrchově aktivních prvků jako jsou síra nebo

kyslík. Tyto prvky mohou zvýšit hloubku protavení, ale mají vliv také na směr prostorového gradientu povrchového napětí a spolurozhodují o směru proudění a tedy i o způsobech přenosu tepla ve svarové lázni [12,13,14,15]. Mezi simulace jevů probíhajících ve svarovém kovu je možné zařadit i simulace a experimenty probíhající za zvláštních podmínek, například ve vakuu nebo v místech s velmi malou gravitací, simulující podmínky beztlížného stavu [16,17].

Další částí, cílenou do první oblasti výzkumu na poli numerických simulací svařování, jsou studie věnované popisu fyzikálních jevů, k nimž dochází v elektrickém oblouku a především na rozhraní elektrický oblouk – svarová lázeň. Tyto studie jsou zaměřeny například na rozložení a působení elektromagnetických sil v oblouku [21,22], distribuci složek plynu mezi svarovým kovem a plazmovým prostředím oblouku [24], děje probíhající při přenosu tepla od zdroje [20] nebo na účinnost tavení materiálu [18,19]. Také je možné simulovat vliv způsobu přenosu kovu na geometrii svarové lázně nebo vliv velikosti kapek na způsoby šíření tepla ve svarové lázni [23].

Druhá oblast výzkumu se věnuje simulacím dějů probíhajících v tepelně ovlivněné oblasti svarů a jde především o studie týkající se fázových transformací a dějů majících vliv na růst austenitického zrna. Právě teoreticky získané výsledky v této oblasti již bylo možné aplikovat také do komerčních software a jsou využívány pro výpočet podílu jednotlivých fází především u nízkolegovaných konstrukčních ocelí a částečně i pro středně a vysokolegované oceli. V současné době se převážně používají Leblondův, Johnson-Mehl-Avramiho a Koistinen-Marburgerův model. [25] Leblondův model je využíván převážně pro aplikace s vysokou rychlostí ohřevu a ochlazování, mezi něž patří například svařování s vysokou hustotou výkonu v dopadové ploše nebo indukční kalení. Johnson-Mehl-Avramiho model vychází také z IRA diagramu a je proto vhodný pro široký okruh ochlazovacích rychlostí, na jedné straně odpovídající rychlostem pro různé metody obloukového svařování a na druhé straně rychlostem chladnutí vzorku v peci, například po žíhání. Koistinen-Marburgerův model je navržen pouze pro transformace, při nichž vzniká martenzit. [26,27]

U simulací růstu austenitického zrna a stanovení kinetiky tohoto děje, je téměř výhradně využívána metoda Monte Carlo [30,31] s Pottsovým zobecněným modelem [28,29]. Značná část prací je zaměřena do oblasti simulací běžného růstu zrn v trojrozměrném prostoru, především pro jednofázové oceli [29,32,33]. Výzkum však probíhá i v oblastech simulací abnormálního růstu zrna, anizotropie zrn, růstu zrn u dvoufázových ocelí [34,35,36] nebo růstu zrn u sintrovaných polykrystalických materiálů [37].

Třetí oblastí numerických výpočtů jsou studie zabývající se otázkami vedoucími ke zlepšení predikce struktury a mikrostruktury svarového kovu a TOO s případnou následnou predikcí vlivu struktury na změnu mechanických vlastností. Mezi takovéto studie patří například

stanovení ztráty legujících prvků propalem [38] vycházející z Langmuirovy rovnice a z gradientu tlaku řídicího přenos hmoty, nebo studie rozpustnosti plynů během obloukového svařování, počítané podle Sievertsova zákona [39,40]. Je také možné simulovat fázové transformace ocelí přímo ve svarovém kovu s využitím Johnson-Mehl-Avramiho rovnice [41] nebo mikrostrukturu ocelí pomocí Scheilova pravidla přísad [42]. Přestože je tato oblast výzkumu poměrně široká a dosahované výsledky vykazují velice dobrou shodu s experimenty, nedošlo prozatím k zobecnění uvedených výsledků, umožňující uplatnění v komerčně využívaných simulačních programech. Důvodem jsou především vysoké nároky na množství vstupních dat takovýchto simulací a také nutnost znalosti rozložení teplot ve svarovém kovu a v elektrickém oblouku.

Naopak výzkumy v oblasti stanovení zbytkových napětí a deformací v průběhu svařování a chladnutí jsou dnes již běžnou součástí numerických simulací řešených ve výrobním procesu. Přesto výzkum v této oblasti neustále pokračuje s cílem aplikovat získané výsledky na nové výpočetní modely pro materiály, u nichž to doposud nebylo možné, nebo byly výsledky zatíženy značnou nepřesností. Pozornost je věnována především výpočtu zbytkových napětí a deformací při použití různých metod svařování [47,51,52,53] a různých typů svarů [54,55], ale také výpočtu zbytkových napětí a deformací u materiálů, které nejsou běžně používané a dostupné. Mezi takové patří například slitiny hliníku s lithiem [43,44], slitiny niklu a titanu [45,46] nebo materiály používané v energetice jako jsou Cr-Mo, nebo Cr-Mo-Ni-V oceli [48,49,50]. Predikované hodnoty vnitřních napětí jsou nejčastěji verifikovány pomocí rentgenové nebo neutronové difrakce, ale využívají se i další metody založené na Barkhausenově šumu nebo na odvrátávání v definovaném místě s měřením pomocí tenzometrické růžice.

Všechna doposud uvedená zaměření a výzkumy v oblasti zbytkových napětí a deformací se týkaly nových teplotně ještě nezatížených materiálů. Mnohé výrobní společnosti však vyžadují také numerické studie zaměřené na jedno nebo vícevrstvé opravné svary a jejich vliv na zbytková napětí a deformace. To se týká jak lokálních oprav na konstrukcích u kterých byly detekovány výrobní vady, tak také plánovaných i neplánovaných oprav na již provozovaných zařízeních. Mezi zájemce o tyto simulace se řadí především výrobci energetických zařízení, jako jsou parní nebo paroplynové turbíny a jejich komponenty.

Pátou oblastí jsou simulace predikující vznik a případně také šíření trhliny při svařování a tepelném zpracování. Na výsledky tohoto typu simulací pak mohou být navázány rovněž výpočty únavové životnosti svarových spojů, ale to již nepatří přímo do této oblasti numerických simulací.

Numerické simulace a predikce vzniku trhlín jsou z velké části zaměřeny právě na svarový kov, případně na blízkou tepelně ovlivněnou oblast. Lze je rozdělit do dvou základních

skupin a to na simulace trhlin vznikajících za horka kam patří především krystalizační a likvační trhliny a na simulace trhlin vznikajících za studena iniciovaných vodíkem. Predikce trhlin vznikajících za tepla vychází ze simulací proudění v tavné lázni a krystalizace svarového kovu. Díky tomu jsou detekována potenciální místa nízkotavitelných eutektik a následně se vyhodnocují napěťová pole v blízkosti těchto eutektik. Nemusí se však jednat pouze o nízkotavitelná eutektika tvořená S a P, ale také například o vliv malých přísad prvků jako je Hf [56]. Velmi často je také simulována náchylnost Ni slitin k tvorbě likvačních trhlin [57,58] nebo děje, k nimž dochází při zkouškách náchylnosti k trhlinám za horka [59,60], jako jsou například zkoušky Varenstraint a Transvarenstraint.

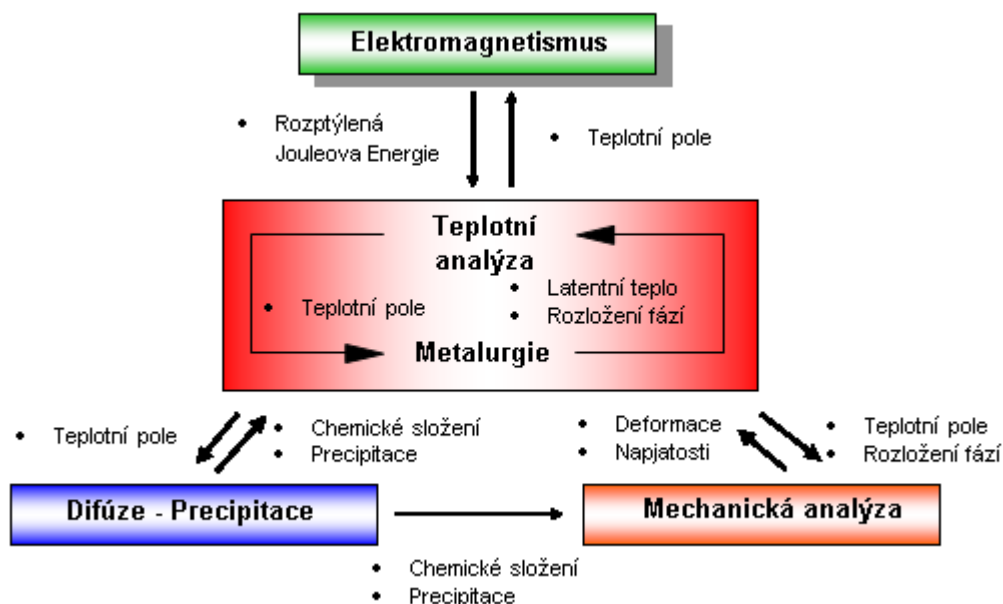
Jiná část páté oblasti se věnuje simulacím vlivu vodíku na vznik trhlin za studena, respektive při teplotách nižších než 200°C. Jedná se zpravidla o trhliny transkrystalického charakteru, vyskytující se v podhousenkové oblasti a ve svarovém kovu ocelí. Předním pracovištěm v této oblasti je Paton Welding Institut v Kyjevě, kde se zabývají simulacemi podmínek vedoucích ke vzniku trhlin iniciovaných vodíkem. Tyto studie vycházejí z redistribučních modelů simulujících rozmístění vodíku ve svarovém kovu při jeho krystalizaci [61,62] a následného stanovení kritických hodnot napjatostí v blízkosti zvýšeného výskytu vodíku. Další studie se zabývají simulacemi vzniku trhlin v TOO a základním materiálu, způsobených difúzí při svařování, ale i při následných katodických ochranách povrchů [63].

Šestou oblastí jsou simulace speciálních způsobů a metod spojování materiálů svařováním. Patří sem například simulace svarů vznikající pomocí tření a to jak běžnými konvenčními způsoby rotačního třecího svařování, tak především s využitím metody FSW [64,65]. Existují také simulace v oblasti ultrazvukového svařování, svařování výbuchem nebo difúzního svařování [47]. Svě zastoupení v této oblasti mají i simulace svařování elektrickým odporem a to zejména svařování bodové [66,67] nebo simulace odporového pájení [68]. Přestože jsou technologie svařování laserem a elektronové svařování dnes již zcela běžné, simulace těchto procesů jsou stále řazeny do oblasti speciálních způsobů [8,20,46,51,53]. Zvláštní kapitolou jsou simulace hybridních metod svařování, mezi něž patří například kombinace Plazma-MIG [7].

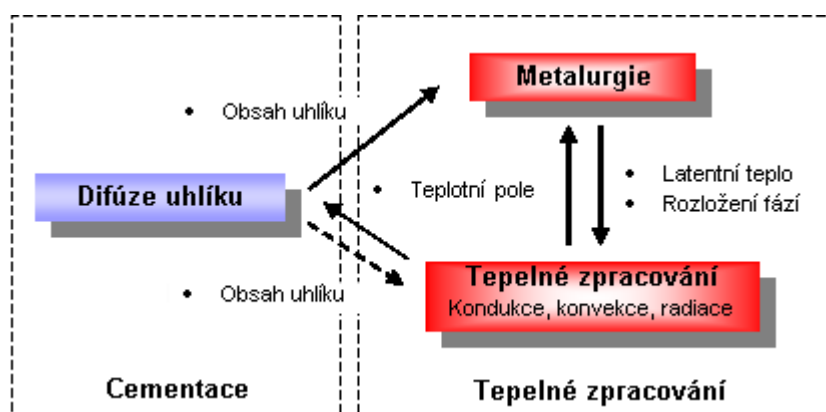
Poslední v pořadí sedmou velkou oblastí zabývající se numerickými simulacemi, je oblast zaměřená na výpočetní programy a simulační nástroje. V oblasti komerčních programů pro simulace svařování a pájení byly dříve využívány programy jako Soldus, Weldcost a Weldvol. V současné době je v oblasti svařování a tepelného zpracování využíván zejména program Sysweld společnosti ESI Group, případně program Simufac společnosti EC Engineering. Pro numerické simulace dílčích částí svařovacího procesu jsou pak využívány programy jako je Ansys nebo Abaqus, které nabízejí mnohem větší kreativitu při volbě typu a

počtu vstupních proměnných. Takováto řešení však zároveň vyžadují po uživateli kompletní matematický popis řešené problematiky v uvedeném programu.

Jak rozdílné jsou ale jednotlivé programy využívané pro simulace svařování a tepelného zpracování? Pominou-li se rozdíly týkající se rychlosti výpočtu s využitím jedno nebo víceprocesorových řešení, případně možnosti zahrnutí analýz mezi simulační výpočty druhé generace, ukazuje se, že architektura uvedených programů je téměř identická. Všechny uvedené programy potřebují obdobnou formu vstupních dat pro řešení nestacionárních teplotních polí i pro následné analýzy. Ty jsou dále zpracovávány identickými posloupnostmi. Rozdíly se tak projevují pouze v drobných odlišnostech matematických popisů řešení, případně v širší škále nabízených výpočetních modelů. Na obrázku 1 je schematicky naznačena zobecněná architektura řešení při analýzách tavného svařování a na obrázku 2 je naznačena architektura řešení při analýzách tepelného zpracování a cementace.



Obr. 1. Zobecněná architektura řešení při analýzách tavného svařování



Obr. 2. Zobecněná architektura řešení při analýzách tepelného zpracování a cementace

3. Problematika vstupních a verifikačních dat numerických simulací

Základním úkolem všech simulačních výpočtů je, aby obdržený výsledek plně vystihoval reálný stav simulovaného děje, popřípadě aby se mu s co největší přesností blížil. Přes tuto snahu je nezbytné respektovat řadu omezujících předpokladů snižujících přesnost, aby bylo vůbec možno úlohu definovat a matematicky popsat. Výsledná přesnost potom závisí na kvalitě vstupních dat, ale také na zkušenostech se simulovanými ději a interpretaci výsledků vzhledem k okrajovým podmínkám.

Pod pojmem vstupní data se skrývají veškeré údaje vstupující do výpočtu a podílející se na definování výpočetního modelu a na stanovení okrajových podmínek výpočtu. Tato data je možné podrobněji rozdělit na vstupní data charakterizující použité materiály, data definující technologický proces a podmínky při něm použité a na data sloužící k vytvoření modelu svarového spoje nebo konstrukčního dílu, na němž je celý proces simulován.

K posouzení vhodnosti použitých výpočetních modelů a postupů pak slouží data verifikační. Tato data jsou určena k potvrzení vhodnosti použitých výpočetních modelů a jsou nejčastěji získávána pomocí experimentů cílených na konkrétní dílčí části simulovaných dějů (hodnoty tvrdosti, deformace, dosažené strukturní fáze, atd.).

Numerické analýzy svařovacích procesů jsou ze své podstaty velmi náročné na množství a kvalitu vstupních dat a na správné definování okrajových podmínek. Vzhledem k tomu, že simulované děje probíhají u většiny svařovacích metod v poměrně širokém teplotním intervalu, je nezbytné tato data definovat ve formě teplotních závislostí. Jak bylo ukázáno v kapitole 2, zaměření simulací svařování je velice široké, zejména v oblasti výzkumu detailních řešení vybraných fyzikálních a technologických dějů probíhajících ve svaru a v TOO. Definovat uceleně problematiku vstupních dat pro všechna tato dílčí řešení je téměř nemožné, proto bude tato kapitola zaměřena na problematiku vstupních dat u komerčně využívaných programů.

Obecně lze říci, že u komerčně využívaných simulačních programů je možné celkový proces numerických simulací svařování rozdělit do dvou základních oblastí na teplotně-metalurgické analýzy a na napěťovo-deformační analýzy. Teplotně-metalurgické analýzy jsou zaměřeny především na výpočet nestacionárních teplotních polí. Jejich tvar závisí na použitém typu modelu zdroje tepla, odvozeném na základě zvolené metody svařování a na použitých procesních parametrech. Pomocí takto získaných teplotních polí je v rámci analýzy dále možné predikovat navazující veličiny, jako jsou fázové transformace, tvrdost struktury nebo velikost austenitického zrna.

U všech metod tavného svařování jsou teplotně-metalurgické analýzy vždy prvním krokem při numerických řešeních. Teplotní děje při těchto analýzách probíhají za podmínek rychle se měnící teploty v širokém rozsahu teplot. Meze uvažovaných změn jsou určeny jednak

teplotou okolí při svařování a jednak teplotou vypařování kovu. V uvedeném teplotním intervalu probíhají procesy jako je tavení základního a přídavného materiálu, metalurgické reakce ve svarové lázni, krystalizace svarového kovu spoje, strukturní a objemové změny, atd. Vznikající teplotní pole jsou proměnlivá v čase a jsou tedy nestacionární. Komplexní řešení dnes vyžadují použít téměř vždy výpočet trojrozměrných teplotních polí. Při řešení procesu šíření tepla v okolí svaru a určení charakteru teplotního pole se vychází ze základní diferenciální Fourierovy rovnice šíření tepla vedením (1). Tato rovnice je odvozena na základě zákona o zachování energie. Rovnice (1) je uvedena bez zahrnutí výkonu vnitřních zdrojů.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda}{c \cdot \rho} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) = a \nabla^2 T \quad (1)$$

Kde:

| | | |
|-------|---|--|
| T | - je teplota v definovaném bodě vzorku | [°C] |
| x,y,z | - jsou souřadnice bodu, ve kterém je definována teplota | [mm] |
| a | - součinitel teplotní vodivosti | [m ² ·s ⁻¹] |
| λ | - součinitel tepelné vodivosti | [W·m ⁻¹ ·K ⁻¹] |
| c | - měrná tepelná kapacita | [J·kg ⁻¹ ·K ⁻¹] |
| ρ | - hustota | [kg·m ⁻³] |

Napětovo - deformační analýzy vycházejí z výsledků teplotně - metalurgických analýz a nelze je provést bez předchozího teplotního zatížení soustavy. Výsledkem jsou napěťová a deformační pole a jejich změny na čase. Lze také například stanovit podíly elastických a plastických deformací v libovolných místech. Získané informace pak slouží k optimalizaci technologických postupů z hlediska eliminace deformací, ale také například ke zjednodušené predikci životnosti svarových spojů.

Způsob získávání vstupních dat pak závisí na typu použité analýzy. Obecně lze vstupní data pro numerické simulace ve svařování rozdělit do čtyř základních oblastí na:

- 1) Materiálová vstupní data.
- 2) Data pro definici a popis tvaru tepelného zdroje.
- 3) Technologická data pro definování okrajových podmínek.
- 4) Data sloužící k vytvoření modelu svarového spoje nebo konstrukčního dílu.

3.1. Materiálová vstupní data

Materiálová data patří do největší a nejvýznamnější skupiny vstupních dat a mají velmi významný vliv na výslednou přesnost provedených numerických analýz. Bohužel z finančního hlediska je jejich získávání velice nákladné. Přestože se ve většině případů

jedná o kombinaci hodnot nalezených v literatuře, doplněných měřeními na zkušebních vzorcích, náklady na tato měření dosahují u materiálů s alotropickou přeměnou až několika set tisíc korun. Výše nákladů je způsobena především požadavkem na měření materiálových vlastností v širokém teplotním intervalu (do teplot okolo 1000°C, případně až do teplot solidu), přičemž jsou vlastnosti měřeny samostatně pro každou z uvažovaných materiálových fází.

Pro teplotně-metalurgické analýzy jsou zpravidla získávána následující materiálová vstupní data:

- ❑ Chemické složení – využíváno ke stanovení tvrdosti struktury.
- ❑ Údaje o fázových transformacích (ARA (CCT) a IRA (TTT) diagramy) využitelné ke stanovení podílu jednotlivých materiálových fází ve struktuře.
- ❑ Data pro stanovení kinetiky růstu austenitického zrna v TOO.
- ❑ Teplotní závislost měrné tepelné vodivosti λ .
- ❑ Teplotní závislost měrné tepelné kapacity c .
- ❑ Teplotní závislost hustoty ρ .
- ❑ Teplotní závislost koeficientu přestupu tepla do okolí α .

Pro napětovo-deformační analýzu je třeba získat následující materiálová vstupní data, opět ve formě teplotních závislostí:

- ❑ Teplotní závislost Youngova modulu pružnosti E .
- ❑ Teplotní závislost meze kluzu R_e .
- ❑ Teplotní závislost meze pevnosti R_m .
- ❑ Teplotní závislost hodnot deformačního zpevnění H .
- ❑ Teplotní závislost Poisonovy konstanty μ .
- ❑ Teplotní závislost koeficientu lineární roztažnosti α .

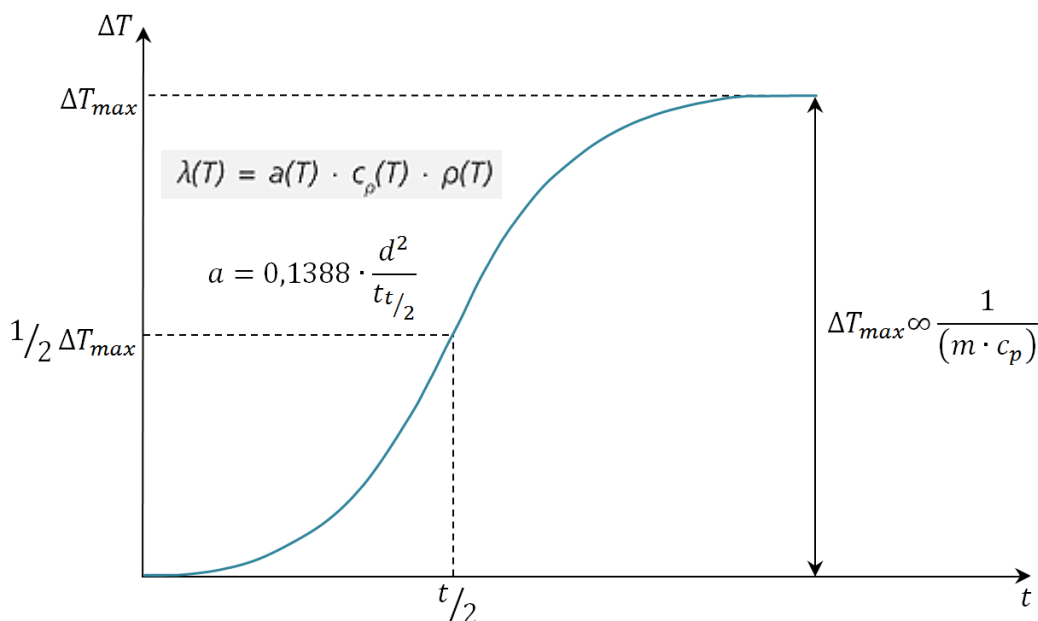
3.1.1. Materiálová data pro výpočet teplotních polí

Materiálová vstupní data pro teplotní analýzy vycházejí především z potřeb Fourierovy diferenciální rovnice vedení tepla. Zpravidla jsou stanovena experimentálním měřením, ale dají se nalézt také v dostupné literatuře zpravidla v teplotním rozsahu 20 až 600°C. Značnou výhodou u těchto dat je také fakt, že materiálové vlastnosti nezbytné pro teplotní analýzy nevykazují až tak významné rozdíly pro jednotlivé typy materiálu (samozřejmě ve stejné kategorii materiálu, např.: vysokolegované austenitické oceli, nízkolegované konstrukční oceli, hliníkové slitiny atd.). K výpočtům teplotních polí jsou zapotřebí již zmíněné teplotní závislosti měrné tepelné vodivosti λ , měrného tepla c , hustoty ρ a také koeficientu přestupu tepla do okolí α .

Součinitel tepelné vodivosti λ charakterizuje vedení tepla látkou proti směru teplotního gradientu. Hustota tepelného toku je pak úměrná teplotnímu spádu. Tepelná vodivost většiny látek je závislá na teplotě. Nejnížší hodnoty tepelné vodivosti vykazují plyny, nejvyšší pak kovy. Tepelná vodivost kovu je obecně vyjádřena superpozicí tepelné vodivosti fononového a elektronového podsystemu, tj. vodivosti prostorové mřížky λ_m a vodivosti vznikající v důsledku tepelných vibrací volných elektronů λ_e [80].

Tepelná vodivost čistých kovů je vyšší než tepelná vodivost jejich slitin. To lze vysvětlit nehomogenitou krystalické mřížky, kterou tvoří atomy příměsí (cizí atomy), jež způsobují nepravidelnost mřížky a zhoršují přenos tepelné energie. Proto mají např. legované oceli nižší tepelnou vodivost než oceli uhlíkové.

Měřicí metoda používaná ke stanovení tepelné vodivosti materiálů je poměrně jednoduchá. Do pracovní komory měřicího přístroje se vloží zkušební vzorek definované tloušťky d . Prostor pracovní komory je následně ohřát na požadovanou teplotu, při které proběhne měření. Po vyrovnání teploty ve zkoušeném vzorku je spodní plocha vzorku zahřáta krátkým energetickým pulsem definovaného výkonu. Na horním povrchu vzorku je pak pomocí infračerveného detektoru snímána změna teploty v závislosti na čase. Výsledkem uvedeného měření je křivka, schematicky znázorněná na obrázku 1. Pomocí této křivky je možné ve shodě s obrázkem 3 stanovit hodnotu tepelné vodivosti materiálu pro příslušnou teplotu v pracovní komoře přístroje. Čím vyšší je tepelná vodivost vzorku, tím strmější bude získaná křivka. Při stanovení teplotní závislosti jsou uvedená měření opakována pro různé teploty v pracovní komoře, dané definovaným teplotním krokem.



Obr. 3. Záznam křivky závislosti $\Delta T / t$ využívaný ke stanovení hodnoty součinitele tepelné vodivosti pro příslušnou teplotu měření [75]

V současné době existuje mnoho typů přístrojů k měření tepelné vodivosti materiálů, které se mezi sebou liší částečně konstrukcí, ale především měřicím rozsahem. Většina takovýchto přístrojů je navržena ke stanovení tepelné vodivosti (respektive tepelného odporu) u izolačních materiálů. Teplotní rozsah takovýchto přístrojů se pohybuje nejčastěji v rozmezí od -30 do 100°C . K získání teplotní závislosti tepelné vodivosti kovů využitelné pro numerické simulace tavného svařování a tepelného zpracování je nezbytný měřicí rozsah od teploty okolí do teploty solidu zkoušeného materiálu. K tomu se používají speciální přístroje určené pro termickou analýzu, mezi které patří například Laser Flash LFA od firmy Netzsch s měřicím rozsahem od -125 až 2800°C .

Přestože je výrobci přístrojů deklarována konstantnost měřicích podmínek, vlastní měření vykazují určitý rozptyl naměřených hodnot záviselý na druhu testovaného materiálu a použité testovací teplotě.

Další ze zjišťovaných veličin, potřebných k výpočtu teplotních polí ve vzorku, je teplotní závislost měrné tepelné kapacity c . Ta je v literatuře také někdy označována jako měrné, nebo specifické teplo a je definována, jako množství tepla potřebného k ohřátí jednoho kilogramu látky o jeden Kelvin a jeho jednotkou je $\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$. Jedná se o charakteristickou vlastnost látky, proto je třeba na zvýšení teploty o stejnou hodnotu dodat různým látkám různá množství tepla. Současně ale platí nerovnoměrnost uvedeného děje v závislosti na teplotě a tlaku. U stejného typu látky je třeba, k ohřátí o stejný rozdíl teplot ΔT , dodat v rozdílných teplotních a tlakových intervalech různá množství tepla. Pro většinu látek pak platí, že s rostoucí teplotou roste zároveň také měrná tepelná kapacita.

V technické praxi se velice často uvádí pojem tepelná kapacita $C [\text{J}\cdot\text{K}^{-1}]$, definovaná jako podíl dodaného (nebo odebraného) tepla Q a teplotní změny ΔT . Tepelné kapacity jsou definovány buď za konstantního tlaku C_P , nebo za konstantní teploty C_V . Vztah mezi tepelnou a měrnou tepelnou kapacitou je dán rovnicí (2).

$$C = m \cdot c \quad (2)$$

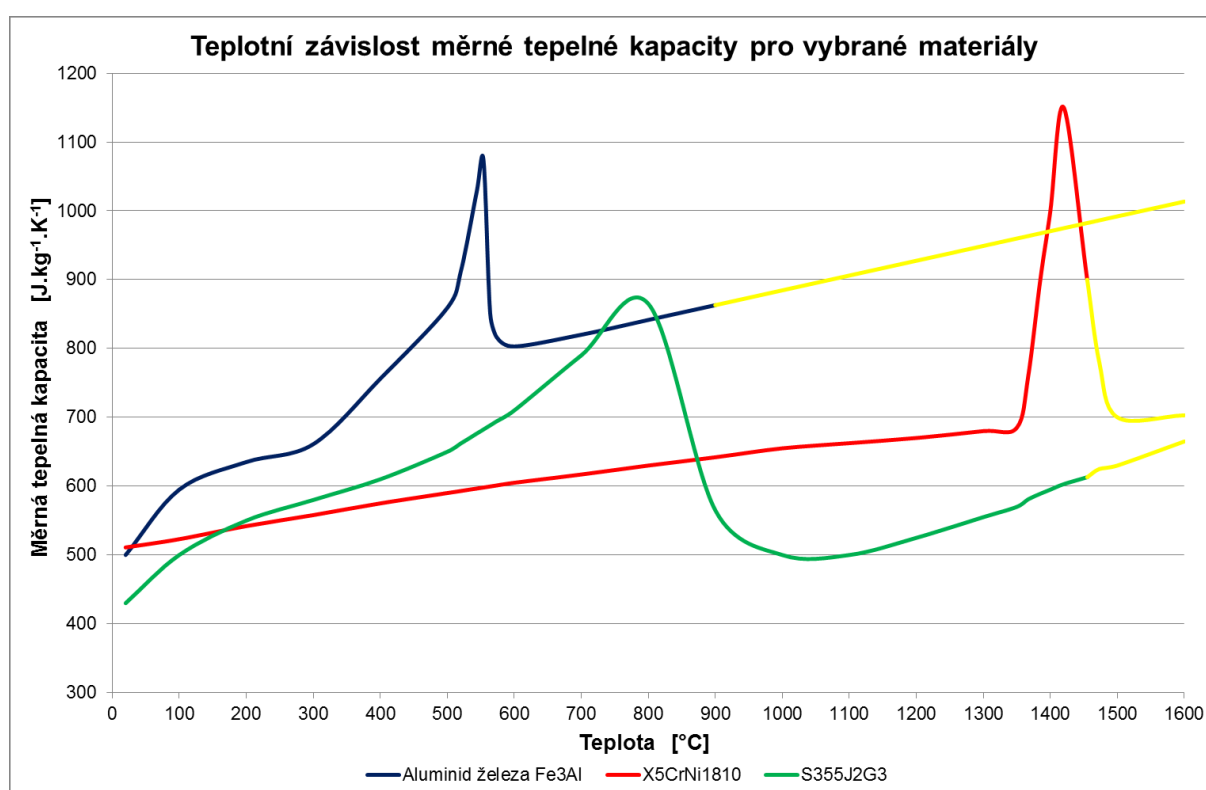
U slitin a sloučenin je tepelná kapacita aditivní vlastností. Jestliže jde o binární slitinu, jejíž složky mají tepelné kapacity C_{PX} a C_{PY} a jestliže atomové podíly složek ve slitině jsou x a y , pak je celková tepelná kapacita slitiny dána vztahem (3).

$$C_P = x \cdot C_{PX} + y \cdot C_{PY} \quad (3)$$

U slitin eutektického typu je toto pravidlo splněno, jak již bylo prokázáno i experimentálně. U tuhých roztoků a intermediálních fází studovaných při vysokých a nízkých teplotách byly nalezeny odchylky, jejichž maximální hodnoty dosahovaly 6 - 8 % a byly jak kladné, tak záporné [77]. Odchylky lze očekávat tím menší, čím bližší jsou si tepelné kapacity složek při dané teplotě. Zjišťování tepelných kapacit za vysokých teplot je velice obtížné, proto se

používají metody, které dovolují vypočítat tepelné kapacity při konstantním tlaku s co největším přiblížením ke skutečnosti. Problematické je zejména stanovení měrného tepla při teplotách odpovídajících fázovým transformacím. Při těchto teplotách je dodané teplo spotřebováváno transformačními procesy a tepelná kapacita materiálu prudce stoupá.

V oblasti transformačních dějů dochází k prudkému nárůstu hodnot měrné tepelné kapacity tak, jak je pro vybrané materiály ukázáno na obrázku 4. Modrá barva zde reprezentuje intermetalickou sloučeninu aluminidu železa typu Fe_3Al , červená křivka reprezentuje austenitickou vysokolegovanou ocel X5CrNi18-8 a zelená křivka reprezentuje konstrukční ocel S355J2. Uvedené hodnoty byly u aluminidu železa měřeny do teploty 900°C a u ocelí X5CrNi18-8 a S355J2 do teploty 1450°C . Žlutá barva pak značí odhadované hodnoty měrné tepelné kapacity tak, jak byly zadány do materiálové databáze v programu Sysweld.



Obr. 4. Teplotní závislost měrné tepelné kapacity pro vybrané materiály [79]

Tepelná kapacita a měrná tepelná kapacita a jejich teplotní závislosti jsou při nižších teplotních rozsazích stanoveny pomocí směšovacích nebo kompenzačních kalorimetrů, s využitím kalorimetrické rovnice. Pro stanovení měrného tepla za vyšších teplot je nezbytné využít vysokoteplotních kalorimetrů vybavených detektorem pro diferenční skenovací analýzu. Takovým přístrojem může být například vysokoteplotní kalorimetr SETARAM MultiDetector HTC s měřicím rozsahem 50 až 1400°C .

Poslední veličinou potřebnou k definování Fourierovy diferenciální rovnice vedení tepla je hustota ρ . Její velikost závisí na atomové stavbě dané látky. Je tedy závislá na poloze prvku

v periodické soustavě prvků. To však platí pouze tehdy, jsou-li v krystalu obsazena atomy všechna uzlová místa. Protože tomu tak ve skutečnosti není, liší se skutečná hustota od té ideální. Například lité kovy mohou mít hustotu až o 3 % menší než kovy tvářené. Protože je hustota také vlastností aditivní, lze ji u směsi látek stanovit z objemu a hustoty jednotlivých jejích složek podle směšovacího pravidla, stejně jako u rovnice (3). Pro neideální roztoky se závislost mezi hustotou a složením zjišťuje empirickou kalibrací. Z toho obráceně plyne, že v binárních nebo pseudobinárních směsích kapalin nebo plynů, popř. roztoků pevných látek, je hustota při dané teplotě a tlaku funkcí jejich složení, což umožňuje ze známé hustoty také odvodit koncentraci rozpustných i nerozpustných látek ve směsi.

K měření teplotní závislosti hustoty ρ jsou většinou použity nepřímé metody měření. Nejčastěji se vychází z hodnot získaných při měření teplotní závislosti koeficientu lineární roztažnosti α . Při předpokladu homogenní tepelné vodivosti ve všech směrech lze z lineární roztažnosti stanovit roztažnost objemovou a tedy i výsledné rozměry zkušební vzorku pro danou teplotu. K měření lineární roztažnosti vzorku se používají LVDT (linear variable differential transducer) dilatometry nebo vysokoteplotní průtahoměry a laserová čidla. Teplotní závislost hustoty je možné považovat za lineární v definovaných mezích. Hranicí intervalu je zde teplota transformace, při níž dochází ke změně typu mřížky. Proto by měla být popsána teplotní závislost hustoty zvlášť pro každý typ mřížky. Protože je hodnota transformační teploty závislá také na rychlosti ohřevu, zjednodušují se často okrajové podmínky tak, že má teplotní závislost hustoty lineární průběh v celém intervalu teplot. Na obrázku 8 v kapitole 3.1.3. je ukázán změřený průběh lineární roztažnosti vzorku z konstrukční oceli S355J2.

Při výpočtu teplotních polí ve svaru a TOO je třeba brát v úvahu kromě přestupu tepla vedením uvnitř materiálu, také přestup tepla do okolí. Ten závisí na okrajových podmínkách realizovaného procesu nebo experimentu. Je třeba si uvědomit, že každá povrchová část svaru může mít a často i má rozdílné podmínky pro přestup tepla do okolí. Proto existují dva různé přístupy k řešení této problematiky při numerických simulacích svařování. První z nich se zaměřuje na návrh a realizaci experimentu, který je koncipován tak, aby okrajové podmínky odvodu tepla byly v celé povrchové ploše pokud možno konstantní, odpovídající volnému povrchu. Poté stačí pro simulaci svařování pouze jeden typ teplotní závislosti koeficientu přestupu tepla do okolí α , odpovídající odvodu tepla volnou plochou.

Druhý přístup naopak bere v úvahu nemožnost použití stejných podmínek pro odvod tepla celou povrchovou plochou. V tomto případě je snaha o co nejlepší definici okrajových podmínek pro jednotlivé povrchové části ochlazovaného dílu a pro každou tuto povrchovou část je definována vlastní teplotní závislost koeficientu přestupu tepla do okolí, odpovídající definovaným okrajovým podmínkám. Druhý přístup je vhodný například při simulacích svařování s předehřevem a dohřevem nebo tam, kde je předepsána a hlídána interpass

teplota. Tento přístup je vhodný také pro simulace tepelného zpracování, kdy jsou okrajové podmínky na povrchu často velmi specifické. Oběma těmito přístupy bude věnována větší pozornost v kapitolách 7.1 a 7.2.

Součinitel přestupu tepla do okolí α je definován mírou intenzity přestupu tepla z teplejšího prostředí do chladnějšího prostředí. Má velký význam při sdílení tepla pohybem makroskopických částic látky. Týká se především tekutin (kapalin a plynů). Při svařování je teplo předáváno do okolí nejen prouděním, ale také sáláním (zářením). To se projevuje zejména při vysokých teplotách. Přibližně od teploty 600°C se záření stává hlavním mechanismem při výpočtu přestupu tepla do okolí [76]. Při výpočtu tepla sdíleného sáláním z objektu teploty T_s do média teploty T_m je možné vycházet z Newtonova vyzařovacího zákona (4). Jedná-li se však o vyzařování do volného prostoru, kdy v dostatečné blízkosti vyzařující plochy není žádné další těleso, které by sálavou energii odráželo zpět, využívá se pro stanovení přestupu tepla sáláním zjednodušený vzorec (5) vycházející ze Stefan-Boltzmannova zákona.

$$Q = \alpha \cdot S \cdot (T_s - T_m) \quad (4)$$

$$\alpha = 4 \cdot \sigma \cdot T_{urč.}^3 \quad (5)$$

kde :

| | | |
|------------|--|--|
| α | - je koeficient přestupu tepla (do okolí) | [W·m ⁻² ·K ⁻¹] |
| Q | - je teplo | [J] |
| S | - je plocha kolmá ke směru toku Q | [m ²] |
| T_m | - je teplota média, | [K] |
| T_s | - je teplota objektu, | [K] |
| σ | - je Stefan-Boltzmannova konstanta | [W·m ⁻² ·K ⁻⁴] |
| $T_{urč.}$ | - je přechodová teplota mezi vyzařující plochou a okolím | [K] |

Při sdílení tepla prouděním dochází k laminárnímu, nebo turbulentnímu samovolnému proudění. O typu samovolného proudění rozhoduje velikost teplotního spádu mezi povrchem svařovaného dílu a okolním prostředím. Je-li tento rozdíl menší než 15°C, jde o proudění laminární. V případě použití tavných metod svařování se proto bude téměř vždy jednat o proudění turbulentní.

Součinitel přestupu tepla prouděním je většinou určen empiricky, pomocí čtyř základních bezrozměrných čísel. Mezi ně patří Nusseltovo číslo charakterizující závislost mezi intenzitou přestupu tepla a teplotním polem v mezní vrstvě proudu tekutiny popsané rovnicemi (6) a (7) a Reynoldsovo číslo charakterizující hydrodynamické průtokové poměry dané rovnicí (10) [77]. Dále pak Prandtlovo číslo popsané rovnicí (8), definující kritérium podobnosti teplotních a rychlostních polí a Grashoffovo číslo popsané rovnicí (9), charakterizující vzájemný vztah

sil molekulárního tření a vztlaku, který je vytvořen rozdílem hustot v různých bodech proudového pole. [77]

$$Nu = \frac{\alpha \cdot l_0}{\lambda} \quad (6)$$

$$Nu = k \cdot (Gr \cdot Pr)^n \quad (7)$$

$$Pr = \frac{\eta \cdot c_p}{\lambda} = \frac{\nu \cdot \rho \cdot c_p}{\lambda} \quad (8)$$

$$Gr = \frac{\alpha^* \cdot g \cdot l_0^3 \cdot \Delta T}{\nu^2} \quad (9)$$

$$Re = \frac{\omega \cdot l_0}{\nu} \quad (10)$$

kde :

| | | |
|------------|---|---|
| α^* | - je koeficient objemové roztažnosti | [K ⁻¹] |
| λ | - je součinitel tepelné vodivosti | [W·m ⁻¹ ·K ⁻¹] |
| l_0 | - je charakteristický rozměr objektu | [m] |
| ω | - je rychlost média | [m·s ⁻¹] |
| ν | - je kinematická viskozita | [m ² ·s] |
| c_p | - je měrné teplo při konstantním tlaku | [J·kg ⁻¹ ·K ⁻¹] |
| η | - je dynamická viskozita | [N·m ⁻² ·s] |
| ρ | - je hustota | [kg·m ⁻³] |
| ΔT | - je teplotní spád mezi objektem a médiem | [K] |
| k, n | - jsou koeficienty stanovené na základě součinu (Gr·Pr) | [-] |

Pro stanovení součinitele přestupu tepla do okolí prouděním v souladu s rovnicí (6) je nejprve třeba určit hodnotu Nusseltova čísla. To je možné pomocí součinu Grashofova a Prandtlůva čísla ve shodě s rovnice (7), přičemž koeficienty k a n stanovené na základě hodnoty součinu (Gr·Pr) je možné použít ve shodě s tabulkou 1.

Tab. 1. Koeficienty k a n pro různé hodnoty součinu (Gr·Pr) [159]

| Součin (Gr · Pr) | 10 ⁻³ | 10 ⁻³ až 5.10 ² | 5.10 ² až 2.10 ⁷ | 2.10 ⁷ až 10 ¹⁴ |
|------------------|------------------|---------------------------------------|--|---------------------------------------|
| k | 0,5 | 1,18 | 0,54 | 0,135 |
| n | 0 | 0,125 | 0,25 | 0,333 |

Při empirickém stanovení hodnot součinitele přestupu tepla do okolí je výhodou fakt, že přestup tepla do okolí není závislý na druhu svařovaného materiálu, pouze na povrchové

teplotě svarku a na teplotě okolí. Tato veličina však může být ovlivněna například prouděním atmosféry v místě měření nebo odraznou plochou předmětů pohybujících se v blízkosti vyzařující plochy. Dalším důležitým kritériem je také poloha povrchu svařovaných dílů, pro kterou se sdílení tepla prouděním počítá. Hodnoty součinitele přestupu tepla prouděním mezi horní a spodní plochou horizontálně orientované desky se mohou lišit až o 30%.

V tabulce 2 jsou uvedeny hodnoty součinitele přestupu tepla do okolí prouděním a sáláním, vypočítané pomocí rovnic (5) až (9) pro horní stranu horizontálně orientovaného povrchu svařence.

Tab. 2. Hodnoty součinitele přestupu tepla do okolí prouděním a sáláním [76]

| Teplota [°C] | 20 | 50 | 100 | 150 | 200 | 250 | 300 | 350 | 400 | 450 | 500 |
|--|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| α [W.m ⁻² .K ⁻¹] | 0 | 26,2 | 34,9 | 41,1 | 46,5 | 51,7 | 57,1 | 62,7 | 68,7 | 75,3 | 82,3 |
| Teplota [°C] | 550 | 600 | 650 | 700 | 750 | 800 | 850 | 900 | 950 | 1000 | 1050 |
| α [W.m ⁻² .K ⁻¹] | 90,0 | 98,5 | 107,7 | 117,7 | 128,5 | 140,3 | 153,0 | 166,7 | 181,5 | 197,4 | 214,3 |
| Teplota [°C] | 1100 | 1150 | 1200 | 1250 | 1300 | 1350 | 1400 | 1450 | 1500 | 1550 | 1600 |
| α [W.m ⁻² .K ⁻¹] | 232,6 | 252,0 | 272,8 | 294,8 | 318,2 | 343,0 | 369,3 | 397,0 | 426,4 | 457,2 | 489,7 |

Další možností určení hodnoty součinitele přestupu tepla do okolí je experimentální měření. Realizace takového experimentu však vyžaduje velice pečlivou přípravu a provádí se laboratorně pomocí kalorimetru, termočlánků a empirických vztahů.

3.1.2. Materiálová data sloužící k predikci tvrdosti struktury a fázových transformací

Tvrdost struktury je predikována na základě znalosti chemického složení základního a přídavného materiálu a na základě informací o strukturním složení v definovaném místě vzorku (svarku). Chemické složení daných materiálů je nejčastěji získáno z materiálových atestů nebo pomocí optických spektrometrů. Existuje ale i řada dalších metod. Mezi nejpresnější z nich patří stanovení složení materiálu pomocí chemické analýzy. Výsledná přesnost této metody je však vyvážena časovou náročností provedené analýzy.

Tab. 3. Rozmezí hm. % prvků pro výpočet tvrdosti po svařování [73]

| | C | Si | Mn | Ni | Cr | Mo | V | Cu | Al |
|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| min. | 0,10 | - | - | - | - | - | - | - | 0,01 |
| max. | 0,50 | 1,00 | 2,00 | 4,00 | 3,00 | 1,00 | 0,20 | 0,50 | 0,05 |

V současné době jsou pomocí numerických simulací predikovány s dostatečnou přesností hodnoty tvrdosti pro nízkolegované a částečně i pro středně legované materiály s prvky pohybujícími se v rozmezí hodnot definovaných tabulkou 3. Výsledná predikovaná tvrdost po svařování nebo tepelném zpracování je stanovena pomocí následujících vzorců (11), (12), (13) a (14). Každý z uvedených vzorců je počítán pro jednotlivé strukturní fáze (martensitická, bainitická, perlitická) a pro rychlost ochlazování v_R dosaženou při teplotě

700°C. Vzorci byly odzkoušeny sérií testů a maximální odchylka pro dané chemické složení a standartní rychlosti ochlazování je 10 Vickersů. [73]

$$HV_{martenzitu} = 127 + 949C + 27Si + 11Mn + 8Ni + 16Cr + 21\log v_R \quad (11)$$

$$HV_{bainitu} = -323 + 185C + 330Si + 153Mn + 65Ni + 144Cr + 191Mo + \log_{10} v_R (10 - 19Si + 4Ni + 8Cr + 130V) \quad (12)$$

$$HV_{feritu} = 42 + 223C + 53Si + 30Mn + 12,6Ni + 7Cr + 1Mo + \log_{10} v_R (10 - 19Si + 4Ni + 8Cr + 130V) \quad (13)$$

Pro oceli s obsahem uhlíku větším než 0,5% je pro výpočet tvrdosti martenzitické struktury použit vzorec (12):

$$HV_{martenzitu} = 1667C - 926C^2 + 150 \quad (14)$$

Pokud jsou ve struktuře predikovány ještě další fáze, jsou pro chemické složení ocelí odpovídající tabulce 3 uvažovány hodnoty tvrdosti 650 HV pro cementit, 150 HV pro ferit a 100 HV pro zbytkový austenit. Výsledné hodnoty tvrdosti jsou pak stanoveny pákovým pravidlem na základě poměrného zastoupení jednotlivých strukturních složek v predikovaném místě.

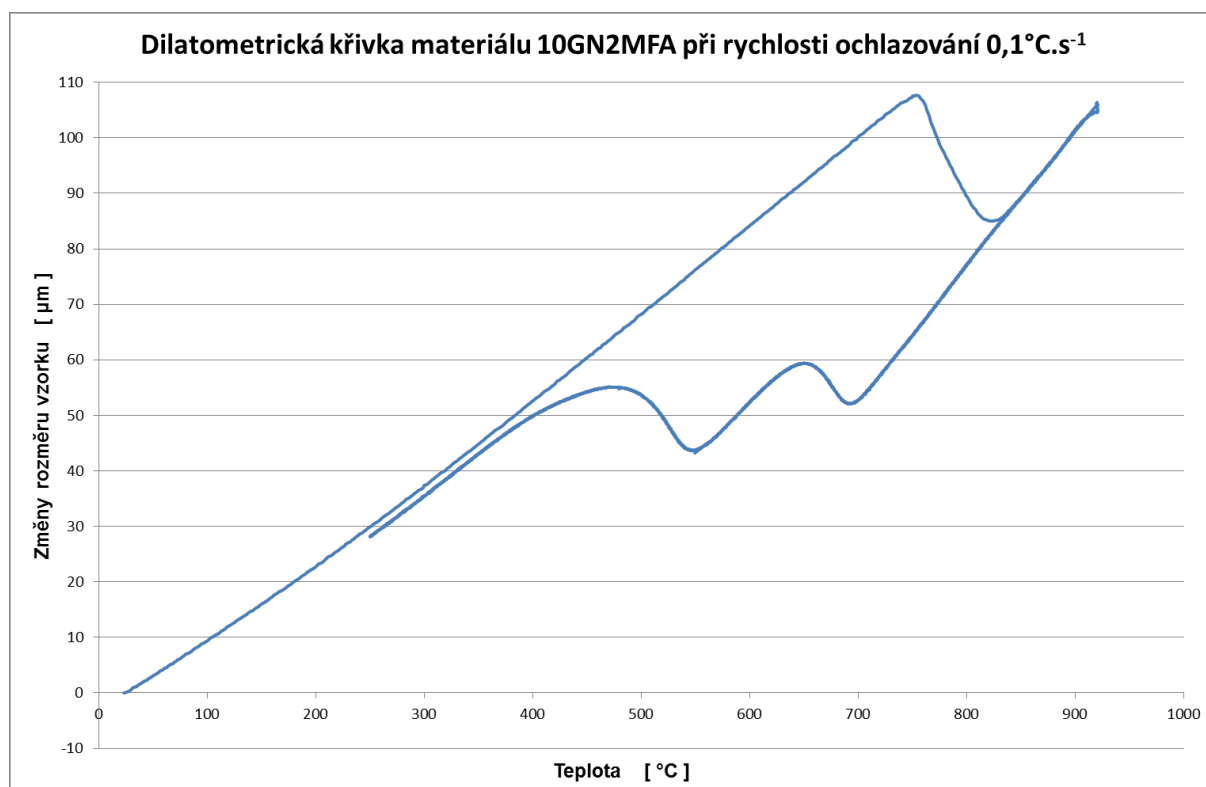
Mnohem větším problémem je predikce tvrdosti u vysokolegovaných martenzitických a bainitických ocelí využívaných v energetickém průmyslu. Při výpočtu tvrdosti dle vzorců (11) až (14) dochází u těchto ocelí k odchylkám predikované tvrdosti oproti realitě dosahujících až desítek procent. Z tohoto důvodu nelze použít uvedené vzorce k výpočtu tvrdosti zejména pro Cr-Mo-V oceli. Postup výpočtu a vhodná oblast použití vzorce bude podrobněji popsána v kapitole 7.

Z uvedeného je zřejmé, že výpočet tvrdosti v daném místě vzorku může být proveden pouze na základě znalostí procentuálního množství fází v příslušném časovém okamžiku. Výpočty fázových přeměn vycházejí z ARA diagramu příslušného materiálu. Pro numerické simulace svařování je však výhodnější použít takzvané „In situ“ ARA diagramy. V tomto případě jsou pro dilatometrická měření použity konkrétní teplotní cykly zjištěné buď experimentálním měřením, nebo odvozené na základě numerických simulací v definovaném místě vzorku. Takto získaná data slouží zároveň jako data verifikační.

Ke tvorbě klasických i „In-situ“ ARA diagramů jsou využívána dilatometrická měření, pracující na principu detekce rozměrových změn, k nimž dochází při přeměnách jednotlivých typů materiálůvých mřížek. K těmto dějům dochází při ohřevu i při ochlazování vzorku. Značný vliv na teplotu začátku a konce fázové transformace má rychlost ohřevu a rychlost

ochlazování, ale také velikost zrna u testovaných vzorků. To je třeba brát v úvahu především při dilatometrických měřeních reálných teplotních cyklů, kdy dochází z důvodu velmi vysoké rychlosti ohřevu k posunutí počátku transformace. Kromě toho nemusí pro zvolený teplotní cyklus dojít k úplnému dokončení austenitické transformace při dosažení maximální teploty cyklu, což následně ovlivňuje transformační pochody při ochlazování a samozřejmě i výslednou tvrdost vzorku.

Na obrázku 5 je ukázána dilatometrická křivka prodloužení vzorku v závislosti na teplotě pro rychlost ohřevu vzorku $10^{\circ}\text{C}\cdot\text{s}^{-1}$ a ochlazovací rychlost $0,1^{\circ}\text{C}\cdot\text{s}^{-1}$. Křivka byla měřena pro bainitickou ocel 10GN2MFA. Z křivky je také možné odečíst, že přeměna typu mřížky $\alpha \rightarrow \gamma$ začala při teplotě 728°C a byla ukončena při teplotě 835°C . Při ochlazování pak došlo ke dvěma přeměnám. První z nich začíná při teplotě 706°C a začátek druhé přeměny je při teplotě 566°C . Tato přeměna je ukončena při teplotě 391°C . Pomocí metalografického vyhodnocení bylo poté zjištěno, že první transformace byla perlitická a druhá bainitická.



Obr. 5. Křivka získaná pomocí dilatometru pro ochlazovací rychlost $0,1^{\circ}\text{C}\cdot\text{s}^{-1}$ [71]

Pro některé technické aplikace není nezbytné určovat podíl jednotlivých metalurgických fází ve vzorku, ale zjišťuje se pouze výsledná tvrdost struktury pro danou ochlazovací rychlost. Tvrdost je totiž velice významný parametr, vypovídající o mechanických vlastnostech dosažené struktury, zejména u svaru a tepelně ovlivněné oblasti.

Postup při tvorbě IRA diagramu je obdobný. Po ohřevu a krátké výdrži na teplotě následuje poměrně rychlé ochlazení na předepsanou teplotu a následná výdrž na této teplotě po

předem stanovenou dobu. Pozornost musí být věnována především tomu, aby rychlost ochlazování na požadovanou teplotu výdrže byla dostatečná a teplota výdrže začínala ještě v oblasti austenitu.

Na základě znalosti teplotních polí a údajů z IRA a ARA diagramů je možné pomocí numerických simulací predikovat podíl jednotlivých strukturních fází v daném místě modelu. K tomu je zpravidla využit jeden z následujících matematických modelů: Leblondův model definovaný rovnicí (15), Johnson-Mehl-Avramiho model definovaný vzorci (16) a (17) a Koistinen-Marburgerův model definovaný vzorcem (18). [25]

$$\frac{dP}{dt} = \frac{(\bar{P} - P)}{t_R} \quad (15)$$

$$P = \bar{P} \cdot \left(1 - \exp\left(-\left(t/t_R\right)^n\right)\right) \quad (16)$$

$$\frac{dP}{dt} = n \cdot \left(\frac{\bar{P}(T) - P}{t_R}\right) \cdot \left(\ln\left(\frac{\bar{P}(T)}{\bar{P}(T) - P}\right)\right)^{(n-1)/n} \quad (17)$$

Kde:

| | | |
|-----------|--|-------|
| P | - je příslušný podíl zjišťované fáze | [%] |
| \bar{P} | - je podíl zjišťované fáze při konkrétní teplotě | [%] |
| t | - je aktuální výpočetní čas | [s] |
| t_R | - je čas zpoždění | [s] |
| n | - je transformační parameter | [-] |

Leblondův model určuje časovou změnu podílu fáze P a je odvozen z ARA diagramu. Johnson-Mehl-Avramiho model určuje časovou změnu podílu fáze P a je odvozen z IRA diagramu, přičemž rovnice (16) platí pro konstantní teplotu, tedy například pro žhání. Pokud teplota není konstantní, je pro výpočet použit vzorec (17). V případě, že je transformační parameter n roven jedné, rovnice (17) je identická s rovnicí (15). Koistinen-Marburgerův model je využíván pouze pro výpočet kinetiky martenzitické transformace podle rovnice (18).

$$P(T) = 1 - \exp\left(-KM(T_{MS} - T)\right) \quad (18)$$

Kde:

| | | |
|----------|--|--------|
| $P(T)$ | - je podíl martenzitu | [%] |
| T_{MS} | - je teplota startu martenzitické transformace | [°C] |
| KM | - je Koistinen-Marburgerův koeficient | [-] |
| T | - je okamžitá teplota | [°C] |

Z hlediska aplikačního využití je Leblondův model využíván především při simulacích s vysokou rychlostí ohřevu a ochlazování jako je například svařování nebo indukční kalení. Naopak Johnson-Mehl-Avramiho model je vhodný pro široký okruh ochlazovacích rychlostí (od poměrně vysokých až k docela nízkým). Používá se pro simulace tepelného zpracování nebo pro simulace svařování s předeřevem. Koistinen-Marburgerův model je využíván pouze pro simulace svařování u materiálů, kde dochází k martenzitickým přeměnám. Je často využíván při simulacích svařování bainitických a martenzitických ocelí.

3.1.3. Materiálová data pro výpočet napětových a deformačních polí

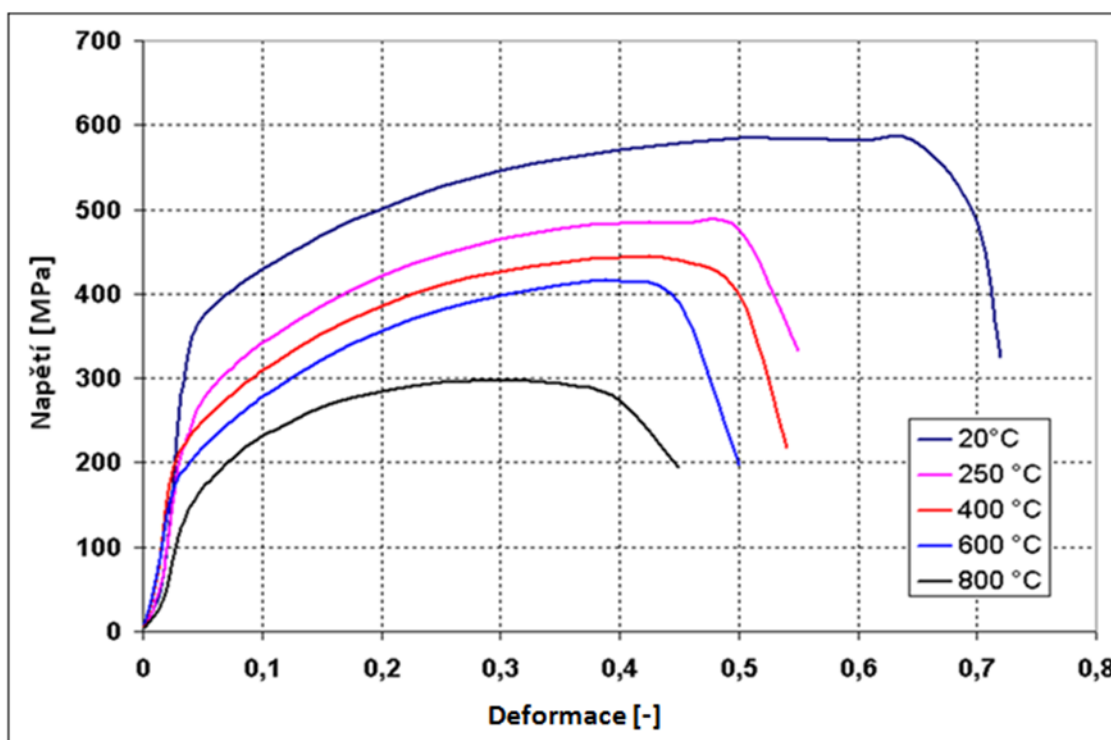
Tato kapitola je zaměřena na materiálová vstupní data nezbytná pro tzv. mechanické analýzy. Tedy analýzy, během nichž jsou na základě známých teplotních polí počítána okamžitá i zbytková vnitřní napětí a také deformace svařence. Tento typ vstupních dat je nezbytné zjišťovat pro každý typ materiálu samostatně, protože výsledné rozdíly jsou i v rámci materiálů stejné kategorie (např. konstrukční oceli) značné.

Většina materiálových vlastností, potřebných pro tento typ analýz, se měří do teploty 1000°C nebo maximálně do 1200°C. Uvedená měření se provádějí buď standardně, pro základní nebo přídatný materiál, případně samostatně pro každou z uvažovaných materiálových fází. U vyšších teplot jsou materiálová data pro numerické simulace svařování zpravidla doplňována aproximačními odhady. S využitím speciálních měřicích přístrojů, mezi něž patří například teplotně-napětový simulátor Gleeble, lze ale tato data měřit až do teploty tavení materiálu, maximálně však do teploty 1700°C.

Mezi data potřebná pro mechanické (napětově-deformační) analýzy se řadí především teplotní závislost Youngova modulu pružnosti E , meze kluzu R_e , meze pevnosti R_m a hodnot deformačního zpevnění H . Všechny tyto vstupní údaje se dají získat z tahových zkoušek provedených za různých teplot. Přitom však platí, že s rostoucí teplotou prováděné zkoušky (především u teplot nad 1200°C) roste obtížnost odečtu hodnot, jako jsou modul pružnosti a mez kluzu z důvodu velmi malých pevnostních sil ve vzorku.

Ze získaných závislostí smluvního napětí R_m na poměrném prodloužení lze pomocí software nebo přímým odečtením z křivek definovat hodnoty E , R_e a R_m . Pokud je navíc k dispozici příslušenství pro snímání redukce vzorku v místě zúžení a krčku, lze stanovit také hodnoty skutečné meze pevnosti R_{ms} . Údaje o hodnotách deformačního zpevnění materiálu H je však nezbytné stanovit manuálně, pro každou statickou zkoušku tahem zvlášť. Jde o odečtení příslušného přírůstku napětí pro definovanou hodnotu plastické deformace. Proto při odečtu bývá hodnota plastické deformace rozdělena rovnoměrně zpravidla na 15 až 25 úseků, pro které je vždy stanoven přírůstek síly. Vyhodnocení se provádí až do hodnoty smluvní meze pevnosti R_m , tedy do okamžiku, kdy se ještě nezačal tvořit na vzorku krček.

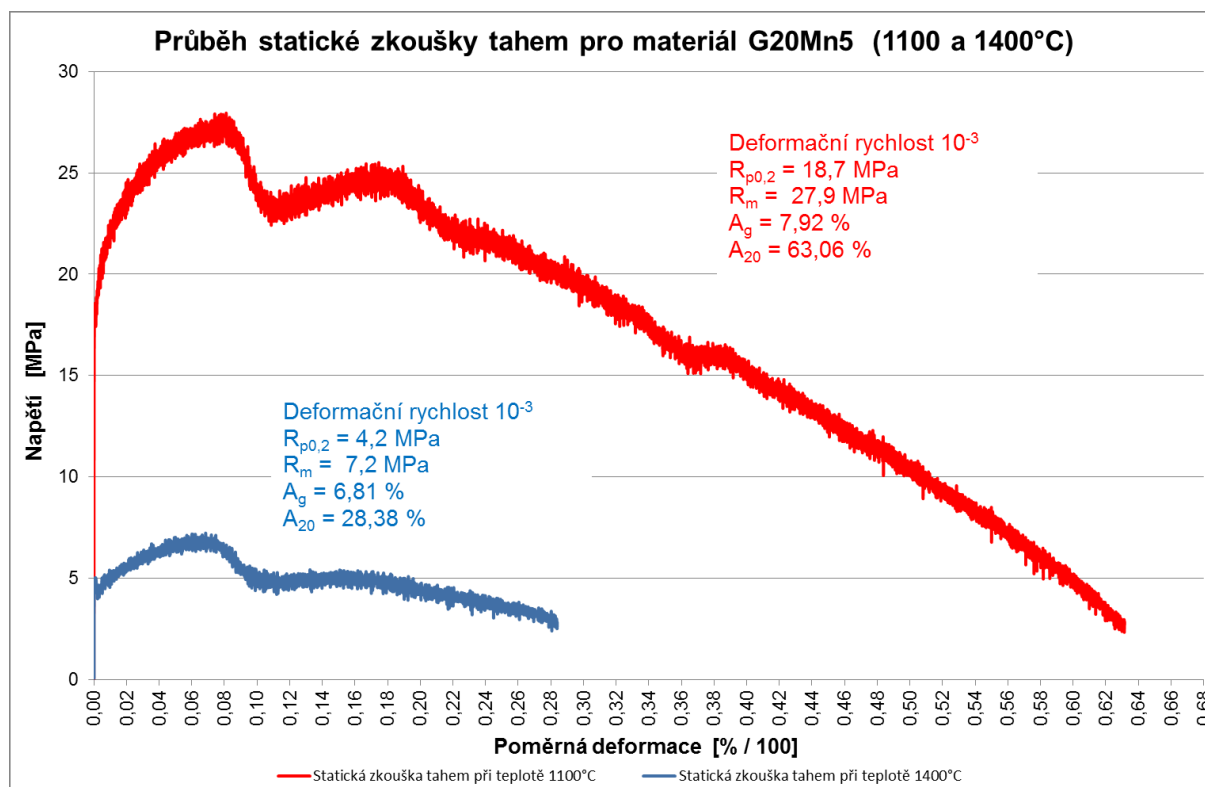
Při měření uvedených vstupních dat je doporučeno provést vždy nejméně dvě, lépe však tři experimentální měření pro každou definovanou teplotu. Díky tomu lze vyloučit vliv případných nehomogenit a vad v testovaném vzorku nebo rozhodnout o provedení dodatečného testu. Pro uvedený způsob testování je také doporučen maximální teplotní krok 100°C. Přesto jsou, především z důvodu ceny, prováděny tahové zkoušky pouze pro vybrané teploty. Na obrázku 6 je ukázán průběh tahových zkoušek na austenitické vysokolegované oceli 316L, pro teplotu okolí a pro teploty 250; 400; 600 a 800°C.



Obr. 6. Průběhy tahových zkoušek provedených pro různé teploty na materiálu 316L [158]

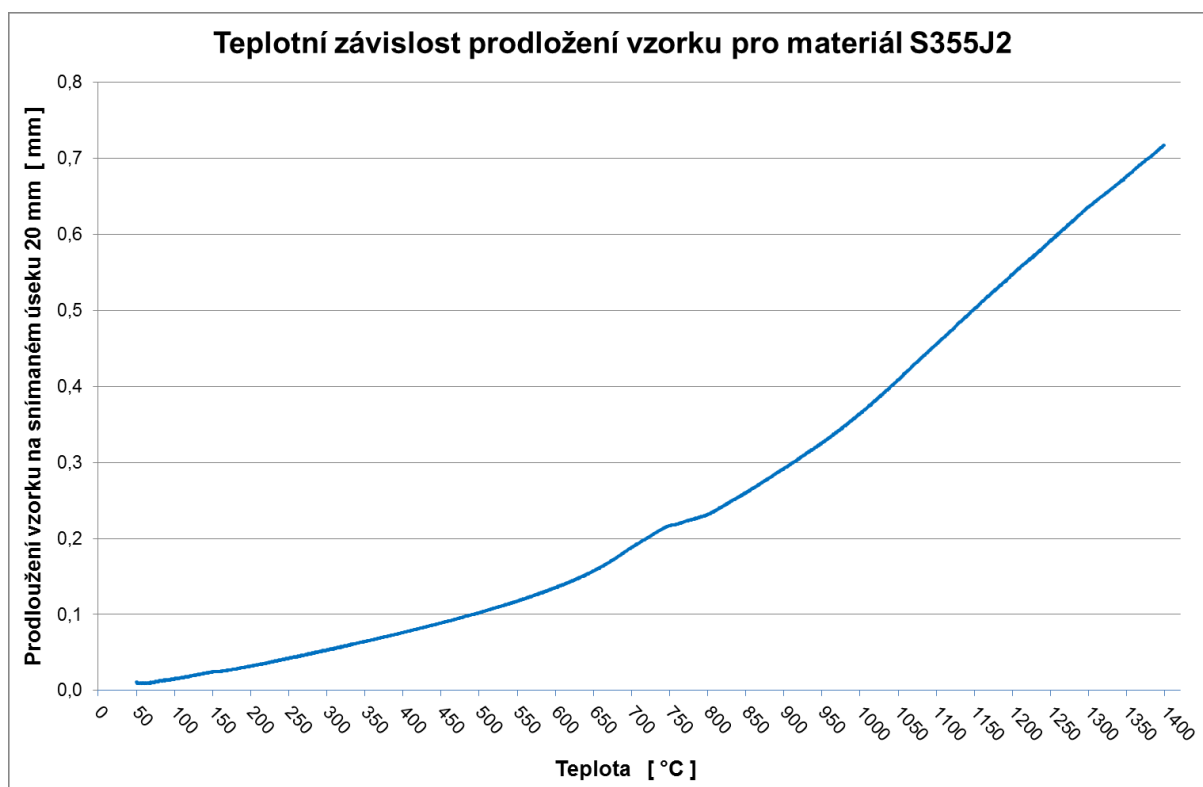
Při vyšších teplotách (>1000°C) však již síly potřebné k deformaci vzorku klesají a siloměrná snímací hlava není schopna snímat s dostatečnou přesností takto malé síly. Výsledkem je proto rozptýl záznamu tak, jak je vidět na obrázku 7. Z toho vyplývá i větší obtížnost vyhodnocení takového záznamu. K uvedenému rozptýlu záznamu dochází i při nižších hodnotách teploty, ale z důvodu dosažení podstatně vyšších hodnot síly potřebné k deformaci vzorku, je tento rozptýl menší než 0,1 % [71]. Proto je na takových křivkách rozptýl nezřetelný. Vliv rozptýlu je možné také eliminovat zvětšením průřezu testovacího vzorku, díky čemuž dojde k částečnému nárůstu zatěžující síly potřebné k deformaci vzorku, nebo použitím snímacích siloměrů s nižším rozsahem síly. Přesto jsou při teplotách v blízkosti solidu zatěžující síly tak malé, že je výsledný rozptýl zřejmý i přes použitá opatření.

Na obrázku 7 je ukázán průběh tahové zkoušky na materiálu G20Mn5 při teplotách 1100 a 1400°C, provedených rychlostí deformace 10^{-3} . Je zřejmé, že pevnostní hodnoty materiálu jsou zde již velmi nízké a dosahují při 1100°C hodnoty R_m 27,9 MPa a při teplotě 1400°C hodnoty R_m pouhých 7,2 MPa. Teplota solidu se, dle heterogenity jednotlivých vzorků, u tohoto materiálu pohybuje v rozmezí od 1469 do 1482°C.



Obr. 7. Průběh tahové zkoušky materiálu G20Mn5 při teplotách 1100 a 1400°C

Další ze vstupních dat, využívaných při mechanické analýze, je teplotní závislost koeficientu lineární roztažnosti α . Tato data jsou nezbytná pro výpočet lokálních i celkových deformací svařovaných konstrukcí. K získání teplotní závislosti koeficientu lineární roztažnosti je možné využít poměrně jednoduchý test, sestávající se z pozvolného ohřevu vzorku na požadovanou teplotu. Po celou dobu ohřevu je snímána délková změna vzorku pomocí teplotního průtahoměru umístěného na upínacích čelistech, nebo při požadavku na maximální přesnost pomocí vysokoteplotního průtahoměru, umístěného přímo na vzorku. Příklad průběhu koeficientu lineární roztažnosti, změřeného pomocí vysokoteplotního průtahoměru HZT072 pro konstrukční ocel S355J2, je ukázán na obrázku 8. Získanou křivku je možné rozdělit do třech oblastí. První oblastí je teplotní rozmezí 20 až přibližně 710°C, poté následují délkové změny způsobené transformačními pochody a přibližně od teploty 810°C je již měřena teplotní roztažnost austenitické fáze oceli S355J2.



Obr. 8. Záznam průběhu teplotní roztažnosti pro konstrukční ocel S355J2

Poslední, z běžně zadávaných materiálových vstupních dat určených k výpočtu napěťových a deformačních polí ve svařenci, jsou hodnoty Poissonovy konstanty μ . Tyto údaje jsou v oblasti numerických simulací využity především při řešení úloh z oblasti elastického a termoelastického chování materiálů. V lineární teorii pružnosti slouží Poissonova konstanta u isotropních materiálů k určení Lamého koeficientů a u anisotropních materiálů k definování tenzoru modulů pružnosti D_E . V nelineární teorii pružnosti pak Poissonova konstanta slouží k definování ekvivalentní deformace ε_{eq} pro malá posunutí a pro velká posunutí k definování Lagrangeovy formulace. Podrobný popis využití a aplikace Poissonovy konstanty je uveden v literatuře [69,70,72].

3.2. Data sloužící k definici a popisu tvaru tepelného zdroje

Jedinými zatěžujícími účinky majícími při svařování vliv na velikost vnitřních napětí a deformací jsou nestacionární teplotní pole a vlastní tuhost konstrukce. Přesné určení teplotního pole během svařování (tzn. především tvaru a rozměru natavené oblasti) je prvním a velmi důležitým krokem k reálnému určení správné struktury a tvrdosti materiálu v TOO, deformací svařence a zbytkových napětí. Z tohoto důvodu je velice významný správný matematický popis tepelného zdroje. Jak již bylo popsáno v kapitole 2, tuto problematiku lze řešit pomocí dvou přístupů. První z nich spočívá v detailním popisu dějů ve svarové lázni

(proudění, vliv povrchově aktivních prvků, vliv elektrického oblouku), což umožňuje přesně definovat teplotní gradient a díky tomu i hranice ztavení. Tyto výpočty jsou však tak náročné na množství vstupních dat a definování okrajových podmínek, že je nereálné jejich využití při simulacích svařování reálných konstrukčních celků. Z uvedených důvodů bude tato kapitola věnována pouze zdrojům tepla využívaných u komerčních simulačních programů. Tyto zdroje jsou odvozeny z ideálních tvarů svarových lázní a jsou modifikovány na základě reálných experimentů provedených pro danou metodu a typ materiálu. Velikost odchylky predikované a experimentálně získané hranice ztavení závisí především na použitém modelu zdroje tepla, procesních parametrech (výkon zdroje, rychlost svařování, účinnost přenosu tepla od zdroje) a typu svarového spoje.

Obecně lze tyto v současnosti používané zdroje rozdělit na jednorozměrné, dvojrozměrné a trojrozměrné. Matematický popis jednorozměrných a dvojrozměrných zdrojů tepla je poměrně jednoduchý, avšak výsledek výpočtu vykazuje celkem velké odchylky od reálných teplotních polí. Trojrozměrné zdroje tepla naopak umožňují získat poměrně dobrou shodu s reálnými teplotními poli, jejich matematický popis je však obtížnější a také čas výpočtu je mnohem delší. Přesto nelze jednoduše preferovat využití pouze trojrozměrných zdrojů tepla, zvláště u speciálních aplikací, jako je povrchové kalení (plošný zdroj s Gaussovým rozložením tepla) nebo stykové odporové svařování (rovinný zdroj tepla). Trojrozměrné zdroje a konkrétně „Dvouelipsoidní model zdroje tepla“ a „3D zdroj s Gaussovým rozložením tepla“ však pokrývají více než 90% simulací pomocí komerčně využívaných software, a proto budou následující kapitoly věnovány právě jim.

3.2.1. 3D zdroj s Gaussovým rozložením tepla

3D zdroj s Gaussovým rozložením tepla, někdy také označovaný jako 3D Gaussian, je modelovým zdrojem tepla, jehož kuželový tvar umožňuje modelovat vysokou energii svařovacího procesu u metod s vysokou hustotou výkonu v dopadové ploše, jako je laserové svařování nebo svařování pomocí svazku elektronů. Mimo to může být tento zdroj využit v kombinaci s jiným modelem zdroje tepla, například pro simulace plazmového svařování nebo pro simulace vysokovýkonných MAG procesů jako je Rapid Arc, T.I.M.E proces, atd. Matematicky lze 3D zdroj s Gaussovým rozložením tepla popsat pomocí rovnic (19) a (20), kdy rovnice (19) popisuje rozložení hustoty tepelného toku do materiálu v závislosti na prostorových souřadnicích a rovnice (20) doplňuje rovnici (19) o parametry tvaru zdroje ve směru tloušťky materiálu. Na obrázku 9 je 3D zdroj s Gaussovým rozložením tepla znázorněn schematicky.

$$q(x, y, z) = Q_0 \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{r_0^2(z)}\right) \quad (19)$$

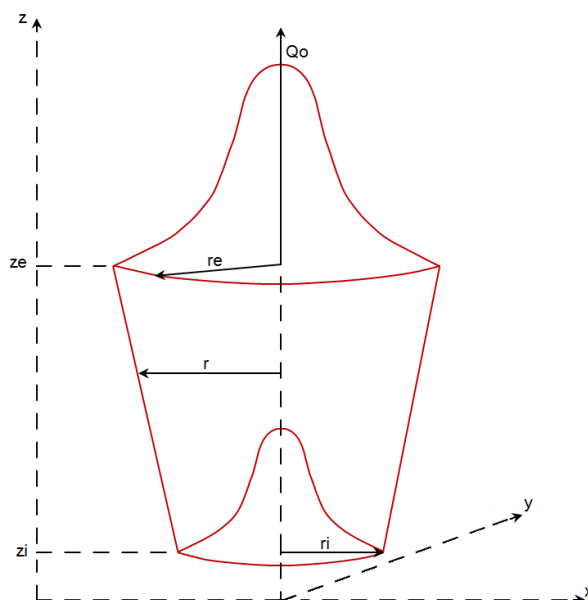
$$r_0^2(z) = r_e + \frac{r_i - r_e}{z_i - z_e} (z - z_e) \quad (20)$$

Kde:

Q_0 - je hustota tepelného toku do materiálu $[W \cdot m^{-3}]$

r_e, r_i - jsou poloměry laserového svaru $[m]$

z_e, z_i - určují hloubku protavení laserového svaru $[m]$



Obr. 9. Schematické znázornění 3D zdroje s Gaussovým rozložením tepla.

3.2.2. Dvouelipsoidní model zdroje tepla

Dvouelipsoidní (nebo také tzv. Goldakův) model zdroje tepla lze v základní nebo modifikované formě použít pro většinu konvenčních metod tavného svařování. Jde o kombinaci dvou do sebe zasazených elipsoidů, majících stejný průnik v rovině dané polohou zdroje a kolmé na směr svařování. Na rozdíl od ostatních prostorových modelů, využívaných pro simulace svařování elektrickým obloukem, je dvouelipsoidní model popisován dvěma rovnicemi (21) a (22) jednotlivě pro každý elipsoid. O tom, kolik z celkového množství tepla vyprodukovaného zdrojem půjde do jednotlivých elipsoidů, rozhodují parametry f_1, f_2 . Jedná se o konstanty ovlivňující rozložení intenzity toku energie do materiálu, které dokáží zohlednit vliv polohy a natočení svařovacího hořáku vůči materiálu. Na základě zkušeností se zpravidla 60% celkového výkonu zdroje směřuje do předního a 40% do zadního elipsoidu. Přitom musí pro parametry f_1, f_2 platit rovnice (23). [27]

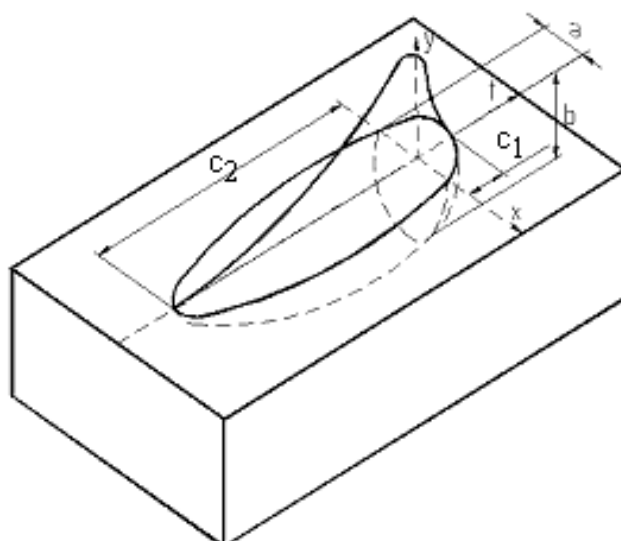
$$q(x, y, \xi) = \frac{6 \cdot \sqrt{3} \cdot f_1 \cdot Q}{a \cdot b \cdot c_1 \cdot \pi \cdot \sqrt{\pi}} \cdot e^{\frac{-k \cdot x^2}{a^2}} \cdot e^{\frac{-l \cdot y^2}{b^2}} \cdot e^{\frac{-m \cdot \xi^2}{c_1^2}}, \quad (21)$$

$$q(x, y, \xi) = \frac{6 \cdot \sqrt{3} \cdot f_2 \cdot Q}{a \cdot b \cdot c_2 \cdot \pi \cdot \sqrt{\pi}} \cdot e^{\frac{-k \cdot x^2}{a^2}} \cdot e^{\frac{-l \cdot y^2}{b^2}} \cdot e^{\frac{-m \cdot \xi^2}{c_2^2}} \quad (22)$$

$$f_1 + f_2 = 2 \quad (23)$$

Kde:

| | | |
|------------------|---|-----------------------|
| $q(x, y, \xi)$ | - je hustota tepelného toku do materiálu | [W·m ⁻³] |
| Q | - je celkový výkon zdroje daný napětím a proudem | [W] |
| a, b, c_1, c_2 | - jsou parametry natavené oblasti (obr. 8) | [m] |
| ξ | - je poloha zdroje v závislosti na rychlosti svařování | [m] |
| x, y, z | - jsou souřadnice bodů | [m] |
| k, l, m | - jsou koeficienty umožňující modifikaci tvaru zdroje tepla | [-] |
| f_1, f_2 | - parametry ovlivňující rozložení intenzity toku energie do materiálu | [-] |



Obr. 10. Schematické znázornění dvouelipsoidního (Goldakova) modelu zdroje tepla

Na obrázku 10 je dvouelipsoidní model zdroje tepla znázorněn schematicky. Aby jej bylo možné definovat, je třeba znát použitý výkon zdroje, rychlost svařování a velikosti natavené oblasti (parametry a , b , c_1 , c_2). Tyto vstupní veličiny jsou zjišťovány pomocí provedených experimentů (monitorizace procesních veličin) a vyhodnocením geometrických údajů (odečtením z makrovýbrusů). Definování vstupních veličin modelu zdroje tepla je však možné také na základě zkušeností nebo kvalifikovaného odhadu. V této oblasti již byly realizovány práce [2], mapující parametrické oblasti pro daný materiál za účelem predikce vstupních veličin a , b , c_1 , c_2 na základě znalosti výkonu zdroje a rychlosti svařování. Díky tomu je možné s dostatečnou přesností (pro daný základní a přídatný materiál a ochranný plyn) predikovat vstupní parametry definující dvouelipsoidní model zdroje tepla.

Nemodifikovaný model je využíván od roku 1997. Na základě doposud provedených prací bylo konstatováno, že nelze tento model v nemodifikované podobě (koeficienty $k = l = m = 3$) použít jako obecný zdroj pro všechny metody svařování elektrickým obloukem. Velice dobré výsledky vykazuje nemodifikovaný model pro svařování obalenou elektrodou a částečně i pro svařování metodou TIG. Pro simulace svařování dalšími metodami (MIG/MAG, SAW atd.) je však nezbytné uvedený zdroj modifikovat. Modifikace spočívá ve změně koeficientů k, l, m v exponentech [2]. Popis způsobu modifikace dvouelipsoidního zdroje tepla je uveden například v [2, 68].

3.3. Technologická data sloužící k definování okrajových podmínek

Technologické vstupní parametry jsou typické tím, že jsou předepisovány na základě znalosti vlastností svařovaného materiálu, konstrukčního řešení svarového spoje a provozních podmínek výsledného produktu. Mezi nejčastěji definovaná technologická vstupní data například patří:

- Druh a množství použitého ochranného plynu, mající vliv na účinnost přenosu tepla od zdroje do materiálu,
- tvar a rozměry svarových ploch (geometrie svarového úkosu, typ svaru),
- vlastní tuhost konstrukce, definování počtu, tuhosti a umístění upnutí svarku,
- teplota předehřevu, dohřevu nebo interpass teplota,
- definování ploch svarku s rozdílnými způsoby přestupu tepla do okolí,
- tepelné zpracování svarku.

Z uvedeného je zřejmé, že technologická vstupní data značně ovlivňují velikost a geometrii natavené oblasti, ale i hodnotu vnitřních napětí a lokální i celkové deformace.

3.4. Data pro definování prostorového modelu

Prostorové a případně i rovinné modely slouží k prezentaci výsledků výpočtů dosažených pomocí vstupních dat a matematických popisů simulovaných dějů. Tyto prezentace mohou být realizovány buď grafickou formou, nebo pomocí definovaných datových souborů. Takto vytvořené modely jsou ve většině případů kopiemi zkušebních vzorků nebo reálných konstrukčních celků, na nichž budou realizovány postupy svařování, případně opravy. Jejich největší výhodou je možnost posuzování simulovaného děje jak z lokálního, tak také z komplexního hlediska.

Prostorové modely oproti rovinným modelům mnohem lépe popisují skutečnost, ale jsou limitovány výpočtovým časem. Vlastní modely jsou složeny z elementů a uzlových bodů, jejichž velikost a hustota závisí na tom, jak podrobně je třeba dané oblasti analyzovat. To

znamená, že nejhustěji zasítovaná je zpravidla oblast svarového kovu a TOO, ale také například místa upevnění svařovaných dílů, nebo prostor okolo připevněných snímacích čidel. Zásadní rozdíl mezi elementem a uzlovým bodem je v tom, že element reprezentuje interval hodnot zobrazované veličiny v definovaném místě modelu pro jeden výpočetní čas, zatímco uzlový bod znázorňuje časovou závislost zobrazované veličiny.

Elementy v modelu se dále dělí podle svého účelu na jednorozměrné, dvojrozměrné a trojrozměrné. Jednorozměrné elementy zpravidla definují dráhu zdroje tepla, nebo směr a pohyb pomocných hořáků či induktorů. Dvojrozměrnými elementy je tvořena obálka prostorového modelu a ta se dále může členit na dílčí plochy reprezentující rozdílné způsoby přestupu tepla do okolí. Trojrozměrné elementy pak vyplňují vnitřní prostor modelu a jsou využity k výpočtu teplotních, strukturních a napěťovo-deformačních změn ve vzorku.

Použitý prostorový model by měl svým tvarem odpovídat reálnému svařenci, včetně dodržení tvaru převýšení svaru či protečení kořene. Před vytvořením prostorového modelu je důležité definovat, z jakých dílčích částí bude celkový model složen a jaká bude velikost jednotlivých oblastí. U tupých svarů bývá zvykem rozdělit si model na následující oblasti:

Oblast svarového kovu – přesněji řečeno oblast tvořená pouze přídavným materiálem (obr. 11, oranžově zbarvené elementy). Důvodem je nutnost postupné aktivace jednotlivých elementů svarového kovu na základě pohybu zdroje tepla. Kromě toho je u materiálů s alotropickou přeměnou nezbytné zohlednit, že přídavný materiál má v okamžiku průchodu zdroje tepla jinou metalurgickou fázi, než materiál základní. Celková oblast svarového kovu je na obrázku 11 znázorněna celkem třemi barvami – oranžovou, světle modrou a zelenou.

Oblast nataveného základního materiálu – tedy část základního materiálu, kde je při svařování dosaženo vyšší teploty, než je teplota tavení daného materiálu (obr. 11, světle modře zbarvené elementy).

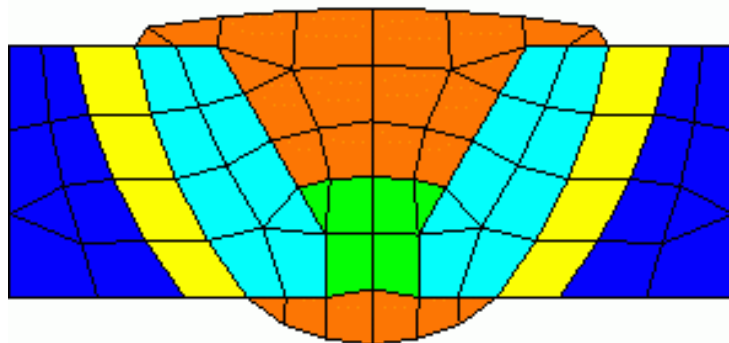
Pomocné skupiny elementů – jde o skupiny vznikající pro konkrétní činnosti potřebné při výpočtu nebo při zobrazování a provádějí se na již hotovém modelu. Tyto skupiny mohou být libovolně aktivovány, nebo deaktivovány podle požadavků řešené úlohy, aniž by došlo ke znehodnocení původního modelu. Mezi takto tvořené skupiny elementů patří například stehy (obr. 11, zeleně zbarvené elementy), nebo oblasti definující přestup tepla do okolí atd.

Tepelně ovlivněná oblast TOO – velikost této oblasti závisí na tvůrci modelu. Uvažuje se obvykle v rozmezí od hranice ztavení až do teplot 700 nebo 500°C. Je však možné také tuto oblast oddělit určitou vzdáleností, např. 10 mm, zvláště když se jedná o typ úlohy zaměřené na optimalizaci postupu svařování v závislosti na hodnotě vneseného tepla do svaru. TOO je také možné rozdělit na více oblastí, například při simulacích zhrubnutí zrna v TOO (obr. 11, žlutá a tmavě modrá barva).

Oblast upevnění svařovaných dílů – je oblastí definující místa dotyků upínek či jiných upínacích mechanismů a místa dotyku dorazů. Pro tyto oblasti je nezbytné definovat také tuhosti daných upnutí a to ve všech uvažovaných osách. Tato upnutí mohou být definována jako dokonale tuhá, nebo s definovanou hodnotou tuhosti.

Oblast základního materiálu – tedy veškeré zbývající oblasti modelu. Tyto oblasti jsou zasíťovány mnohem menší hustotou elementů, případně se zde uplatňují řešení pomocí skořepin.

Na obrázku 11 jsou barevně zobrazeny jednotlivě generované skupiny elementů. Oranžová barva reprezentuje oblast svarového kovu tvořeného přídavným materiálem, světle modrá je oblast nataveného základního materiálu a zeleně je vyznačena oblast stehů. Žlutá barva tvoří první část tepelně ovlivněné oblasti a tmavě modrá barva tvoří druhou část tepelně ovlivněné oblasti.

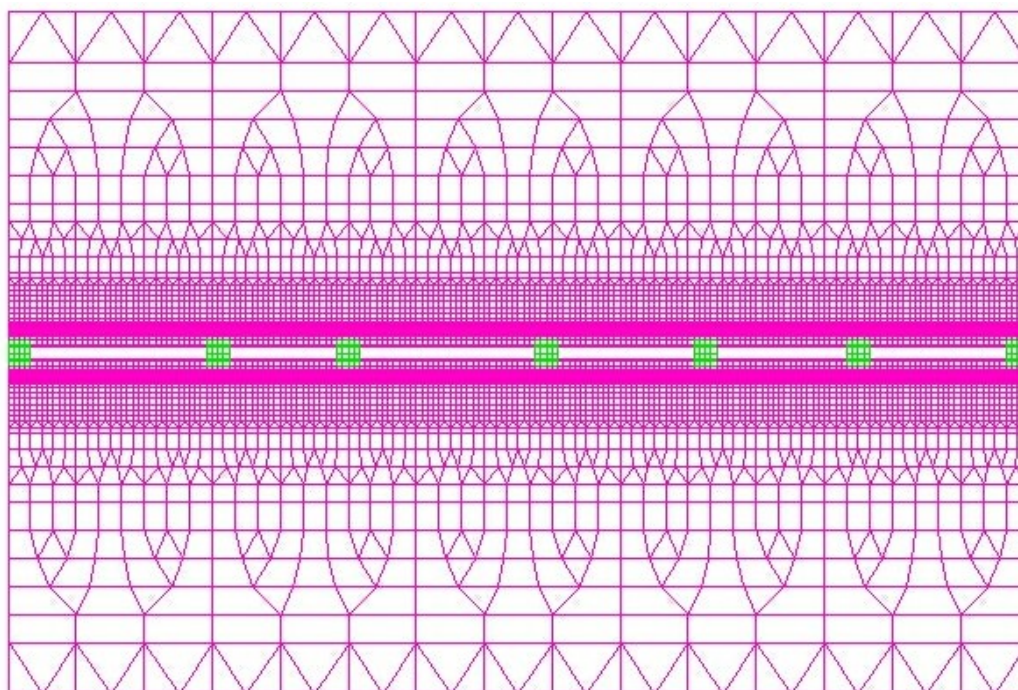


Obr. 11. Cíleně generované skupiny elementů v prostorovém modelu zobrazené v řezu kolmém na směr svařování [27]

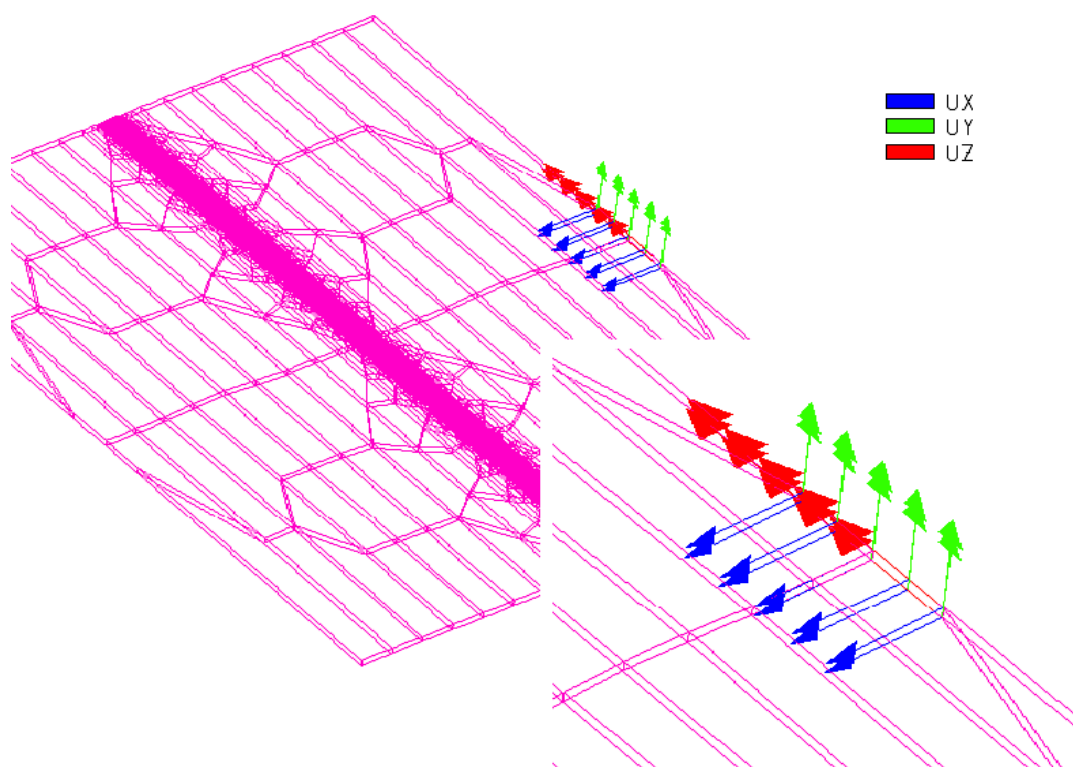
Vytvoření vlastního prostorového modelu na základě uvedených kritérií je již pouze mechanickým procesem. Popis postupu tvorby prostorového modelu a vliv hustoty sítě na přesnost simulace je popsán například v literatuře [27,78,81]. Po dokončení celkové geometrie modelu vznikají tzv. pomocné skupiny elementů a uzlových bodů. Tyto skupiny jsou speciálně zaměřeny na konkrétní činnosti potřebné při výpočtu, nebo při grafickém zobrazení výsledků. Je možné je opakovaně vytvářet nebo rušit, aniž by došlo ke znehodnocení původního modelu. Mezi typické představitele speciálních skupin elementů patří například místa stehů (obr. 12), které jsou ve výpočtech opakovaně zapínány a vypínány v závislosti na optimalizaci postupu svařování. Model zobrazený na obrázku 10 tak nabízí variantní numerické řešení pro 0 až 7 stehů.

Mezi typické představitele speciálních skupin uzlových bodů patří především místa upevnění svařence (obr. 13). V těchto uzlových bodech je kromě polohy definována také přítláčná síla, případně odpor proti posunutí ve směru jednotlivých os. Kromě toho jsou uvedené skupiny

použity k definování umístění modelu v prostoru pomocí minimálně tří uzlových bodů neležících na jedné přímce.



Obr. 12. Prostorový model se 7 skupinami elementů reprezentující stehování materiálu [1]



Obr. 13. Skupiny uzlových bodů sloužících k definování místa a způsobu upnutí [27]

4. Materiály využívané v energetickém průmyslu

Rozvoj civilizace a technický pokrok byl a je úzce provázán se schopností využívat energetické zdroje, v současnosti především zdroje pro výrobu elektrické energie. Energetika je proto velmi významným odvětvím pro další všestranný rozvoj společnosti. I přes nástup různých alternativních zdrojů zůstávají pro výrobu elektrické energie rozhodující tepelné elektrárny spalující fosilní paliva a jaderné elektrárny využívající radioaktivního rozpadu prvků. Ještě nedávným trendem v této oblasti byl pozvolný ústup od užívání fosilních paliv ve prospěch jaderné energie a obnovitelných zdrojů. Důvodem byla především ekologická hlediska. To se však částečně změnilo po nehodě v japonské jaderné elektrárně Fukušima, po níž některé státy deklarují odklon od jaderné energie.

V současné době vyprodukují elektrárny spalující fosilní paliva okolo 40% veškeré světové elektrické energie. Přestože patří mezi intenzivní globální producenty emisí CO_2 , předpokládá se pokračování jejich provozu minimálně v dalších 30 až 40 letech [82]. Proto každé vylepšení tepelné účinnosti těchto zařízení má vliv nejen na finanční úsporu investora, ale také na životní prostředí. Zvyšování účinnosti je však limitováno vlastnostmi použitých konstrukčních materiálů. [86].

Elektrárny na fosilní paliva provozované v současnosti, je možné rozdělit podle jejich provozních parametrů na tzv. podkritické (sub-critical), provozované při teplotách do 538°C a tlacích do 16,7 MPa, superkritické (SC), provozované při teplotách v rozmezí 540 až 566°C a tlacích do 25 MPa a na ultra-superkritické (USC), provozované při teplotách v rozmezí 580 až 620°C a tlacích do 28 MPa. Podkritické tepelné elektrárny jsou provozovány s účinností okolo 35%, zatímco u superkritických elektráren dosahuje účinnost až 46% a ultra-superkritické elektrárny jsou provozovány s účinností blíží se 50% [83]. Předpokládané vývojové tendence provozních parametrů uvažují růst teploty až k 700°C při provozních tlacích okolo 35 MPa [84]. Tyto tendence současně předpokládají nástup nových materiálů především na bázi slitin Ni. Celková účinnost zařízení by pak měla přesáhnout 50 % [84]. V roce 2007 bylo po světě provozováno okolo 250 SC a 25 USC elektráren a od té doby došlo k dalšímu nárůstu počtu především USC elektráren [83].

U jaderných elektráren jsou jejich pracovní parametry závislé především na typu použitého reaktoru. Kromě namáhání použitých materiálů za zvýšených teplot a tlaků je nezbytné v aktivní zóně reaktoru posuzovat i vliv záření. V současných tlakovodních jaderných reaktorech se parametry chladiva pohybují na výrazně nižších hodnotách, než jsou kritické parametry. Teplota nepřesahuje 350°C a tlak se drží do 16 MPa [86]. Protože jsou uvedené provozní parametry nižší než u tepelných elektráren, nižší je také účinnost (32 až 38%).

Jaderné reaktory je možné rozdělit podle nejrůznějších hledisek, například na stacionární, ponorkové, družicové a podobně. Častěji však jejich rozdělení vychází z typu moderátoru (látky zpomalující neutrony a podporující štěpení) a chladiva zabraňujícího

úniku štěpných produktů a odvádějícího vyprodukované teplo k dalšímu využití [85]. Jako moderátory jsou nejčastěji využívány lehká a těžká voda nebo grafit a jako chladivo opět lehká a těžká voda, dále pak oxid uhličitý, helium a sodík. Ve vývoji jsou však ještě další reaktory, tzv. jaderné reaktory IV. generace. Patří sem například plynem chlazené rychlé reaktory (GFR), rychlé reaktory chlazené kapalným olovem nebo eutektickou slitinou olovo bismut (LMFR), reaktory chlazené tavenými solemi (MSR), nebo reaktory chlazené vodou se superkritickými parametry (SCWR). Tento poslední typ reaktoru by měl dosáhnout účinnosti až 46%. Více o reaktorech a jejich označování je možné získat z [85].

Vzhledem ke snahám o zvýšení technických parametrů energetických zařízení a vzhledem k požadavkům na vlastnosti konstrukčních materiálů je možné se setkat v energetickém strojírenství s nelegovanými, nízko a vysokolegovanými oceli. Dále pak se speciálními typy ocelí a s neželeznými kovy a jejich slitinami [86]. Tato práce se bude dále věnovat pouze ocelím využívaným v energetickém průmyslu.

4.1. Oceli pro energetické strojírenství

Rozdělit a obecně uspořádat oceli využívané v energetickém strojírenství je velmi složité. Je sice možné vycházet částečně z normy **ČSN EN 10020 – Definice a rozdělení ocelí** a rozdělit tyto materiály na nelegované oceli, korozivzdorné oceli a ostatní legované oceli podle chemického složení. Z hlediska zamýšleného zaměření této práce však bude vhodnější zaměřit se pouze na oceli pro práce za zvýšených teplot a ty pak dále dělit podle charakteru provozu a využití jejich specifických vlastností na oceli žáruvzdorné a žárovevné. K tomuto rozdělení lze přistoupit v souladu s normami **ČSN EN 10088-1 Korozivzdorné oceli – Část 1: Přehled korozivzdorných ocelí** a **ČSN EN 10302 – Žárovevné oceli, niklové a kobaltové slitiny**.

Z hlediska vlastností lze za žárovevné považovat materiály schopné dlouhodobě odolávat mechanickému namáhání za dané teploty. Měřítkem žárovevnosti je mez tečení nebo mez pevnosti při tečení. Mez tečení σ_T [MPa] je charakterizována jako napětí, které za definované časové období a při dané teplotě zkoušky vede k dané velikosti deformace. Mez pevnosti při tečení σ_{TPt} [MPa] je potom definována jako napětí, které za definované časové období a při dané teplotě zkoušky vede k porušení zkušební vzorku. Oceli tohoto typu pracují v oblasti creepového namáhání.

Žáruvzdornost je pak charakterizována jako schopnost materiálu dlouhodobě odolávat opalu. Do této skupiny jsou řazeny oceli schopné v oxidačním prostředí dlouhodobě odolávat teplotám vyšším než 600 °C. Tyto oceli ale nejsou schopné přenášet větší mechanická namáhání. Žáruvzdorné oceli jsou nejčastěji děleny podle chemického složení na chromové, chromniklové a chrommanganové oceli [94].

Oceli uvedené v normě ČSN EN 10088-1 jsou rozděleny do tří hlavních skupin na odolné proti korozi, žárovevné a žáruvzdorné. Žárovevné oceli, jimž bude věnována hlavní pozornost, jsou pak dále podle struktury rozděleny do dvou skupin na:

- Martenzitické žárovevné oceli
- Austenitické žárovevné oceli

Martenzitické žárovevné oceli obsahují jako hlavní legující prvek Cr v množství 8 až 12,5 %. Dalšími legujícími prvky jsou Mo, V, případně další legury jako je Nb, W, Ni, N, Co, B. Obsah uhlíku v těchto ocelích se pohybuje v rozmezí od 0,05 až do 0,24 %. Přehled martenzitických ocelí včetně jejich chemického složení podle ČSN EN 10088-1 je uveden v příloze 1.1.

Austenitické žárovevné oceli obsahují základní legující prvky Cr a Ni. Obsah chromu se zde pohybuje v rozmezí 13,5 až 26 % a obsah niklu v rozmezí 8 až 34 %. Dále mohou obsahovat prvky jako je Mn, Mo, W, V, Nb, Ti, Al, Co, B, N. Obsah uhlíku v těchto ocelích je všeobecně nízký od 0,03 až do 0,16 %. Přehled austenitických ocelí včetně jejich chemického složení podle ČSN EN 10088-1 je uveden v příloze 1.2.

V normě ČSN EN 10088-1 jsou v příloze A uvedeny orientační údaje o některých fyzikálních vlastnostech ocelí a to i v závislosti na teplotě, což je výhodné pro kontrolu a verifikaci materiálových databází vstupních dat pro simulační software. V příloze D je pak přehledně zpracována matrice přiřazení ocelí do ostatních norem.

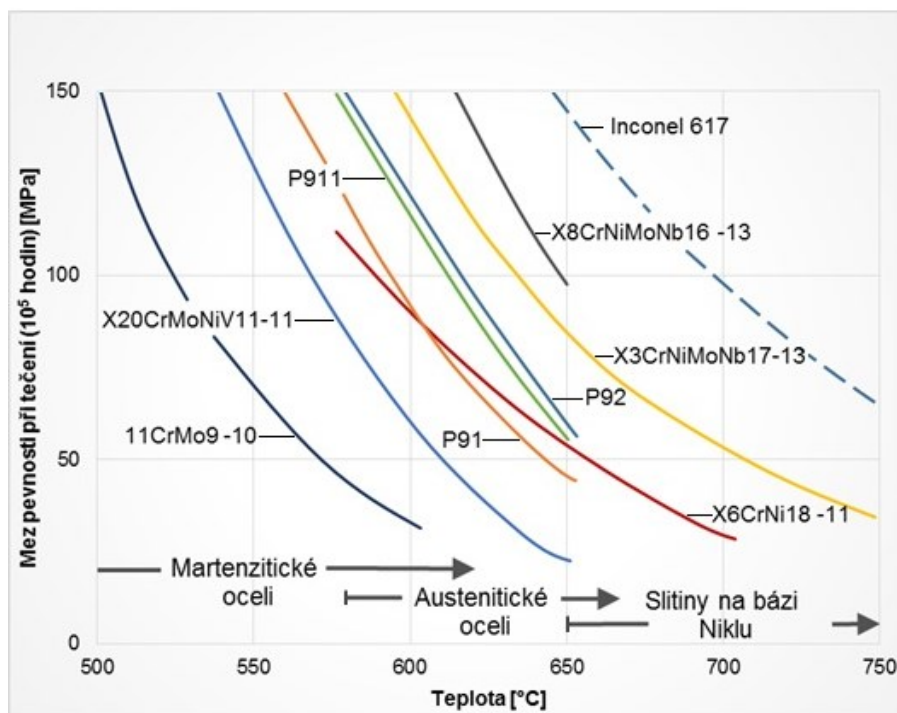
Norma ČSN EN 10302 pak definuje tvářitelné oceli a slitiny využívané pro součásti a vybavení, u nichž je hlavním požadavkem žárovevnost. Za žárovevné materiály se podle této normy pokládají oceli, s minimálním obsahem chromu 8 %, které jsou charakteristické dobrými mechanickými vlastnostmi při teplotách nad 500 °C za podmínek dlouhodobého provozního namáhání a to především na mezi tečení při poměrném prodloužení 1 % nebo na mezi pevnosti při tečení.

V souladu s touto normou jsou oceli podle struktury děleny opět na martenzitické a austenitické. Přehled uvedených ocelí včetně jejich chemického složení je pro martenzitické oceli uveden v příloze 1.3. a pro austenitické oceli je přehled uveden v příloze 1.4. V normě ČSN EN 10302 jsou rovněž uvedeny mechanické vlastnosti žárovevných ocelí při teplotě okolí a hodnoty meze kluzu v teplotním intervalu 50 až 900°C. Dále jsou v příloze B této normy uvedeny údaje k tepelnému zpracování uvedených ocelí a v příloze C jsou údaje o mezi tečení při poměrném prodloužení 1 % a meze pevnosti při tečení pro 10^4 , 10^5 a $2 \cdot 10^5$ hodin.

Přehled martenzitických žárovevných ocelí je v obou uvedených normách shodný, pouze u austenitických žárovevných ocelí je v normě ČSN EN 10088-1 uvedeno několik austenitických ocelí navíc.

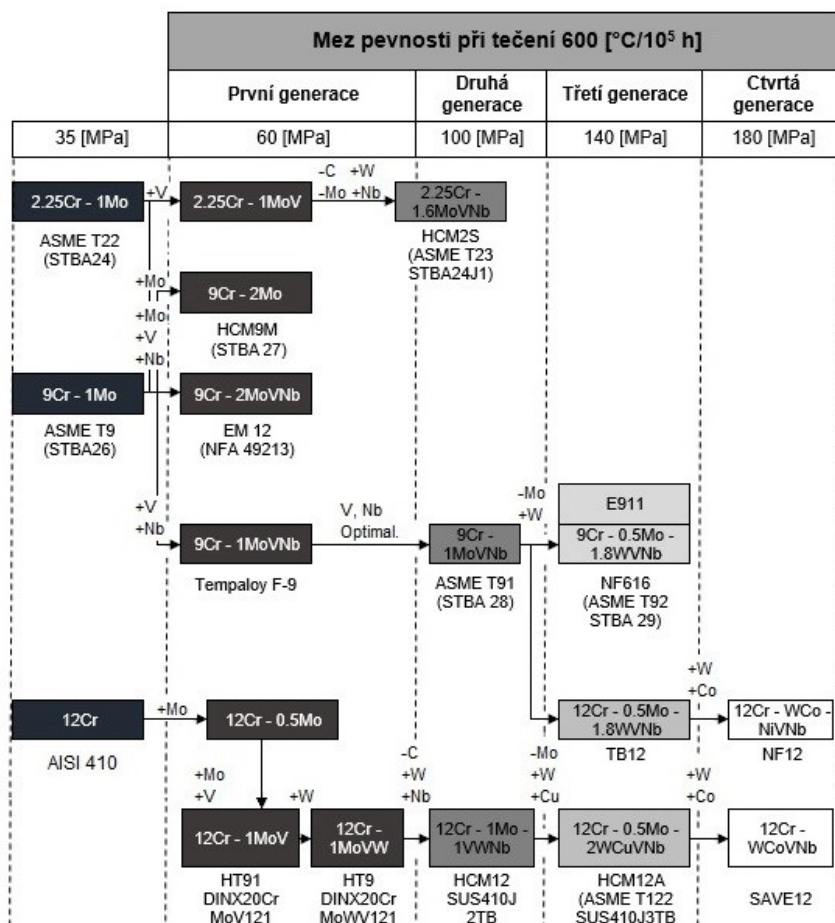
4.2. Porovnání žárovevných ocelí

Žáropevné materiály používané pro vysokoteplotní aplikace jsou porovnávány podle hodnoty meze pevnosti při tečení pro danou teplotu. Na základě podkladů od IMO (International Molybdenum Association) [87] je na obrázku 14 ukázáno porovnání teplotních závislostí hodnot meze pevnosti při tečení pro různé vybrané materiály a pro provozní dobu 10^5 hodin. Na obrázku jsou také vyznačeny meze aplikovatelnosti jednotlivých typů žárovevných materiálů, tedy martenzitických a austenitických ocelí a slitin na bázi niklu. Z martenzitických ocelí dosahují nejvyšších hodnot meze pevnosti při tečení modifikované 9 až 12 % Cr oceli. Vývojové tendence tohoto typu ocelí jsou pak ukázány na obrázku 15 [88]. Jak je z grafu zřejmé, u třetí generace tohoto typu ocelí došlo ke zvýšení hodnot pevnosti při tečení přidáním přísad, jako jsou Mo a W a čtvrtá generace 12% Cr ocelí zvyšuje svou žárovevnost přidáním přísad W a dále také Co.

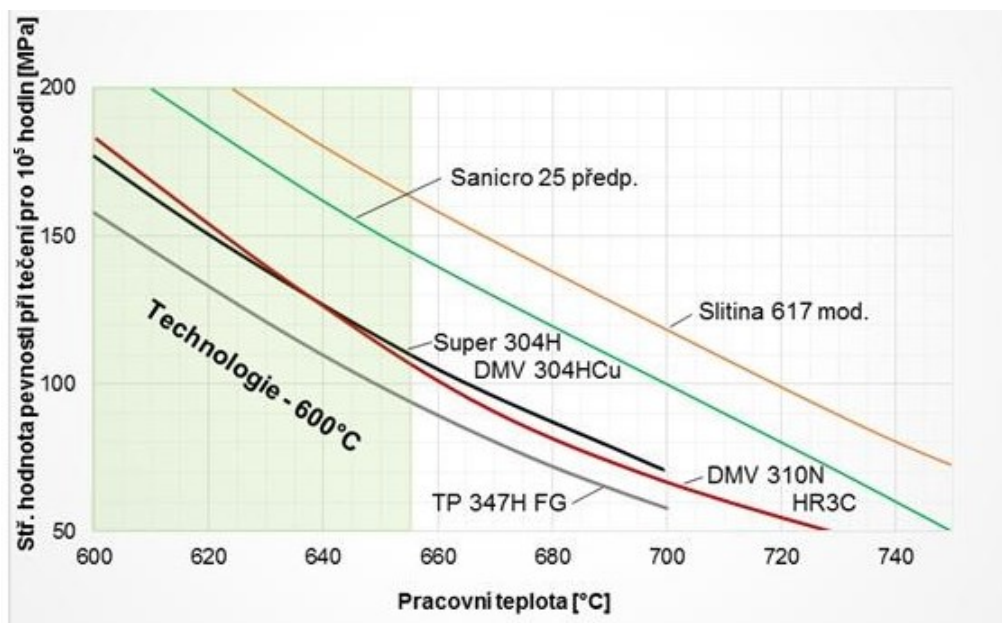


Obr. 14. Teplotní závislost hodnot meze pevnosti při tečení (10^5 hodin) pro různé vybrané materiály používané v tepelných elektrárnách [87]

Na obrázku 16 jsou ukázány teplotní závislosti meze pevnosti při tečení austenitických ocelí a slitiny niklu [84]. Vývoj nových materiálů pro USC elektrárny stále pokračuje. Martenzitické oceli jsou v některých aplikacích nahrazovány oceli austenitickými, mezi které patří také vývojové austenitické oceli typu 23Cr-45Ni-7W označované jako HR6W. Podle obsahu Ni v materiálu (45%) by se však již mohlo o tomto materiálu mluvit jako o slitině Ni. Meze pevnosti při tečení může být u tohoto materiálu dále zvýšena modifikací B a Mg [90].



Obr. 15. Schéma vývoje modifikovaných chromových ocelí (mez pevnosti při tečení 600°C/10⁵ h) [88]



Obr. 16. Hodnoty meze pevnosti při tečení (10⁵ hodin) vybraných austenitických ocelí a modifikované slitiny niklu Alloy 617 [84]

Vývoj pokračuje i v oblasti materiálů pro vysokoteplotní jaderné reaktory IV. generace. Studují se zde například vlastnosti oxidy disperzně zpevněné martenziticko-feritické oceli tzv. ODS oceli, s následujícím chemickým složením (20 hm.% Cr, 5,5 hm.% Al, 0,5 hm.% Ti, 0,5 hm.% Y_2O_3) [91]. Existuje však více variant těchto typů ocelí.

4.3. Svařitelnost ocelí pro energetické strojírenství

Z pohledu svařitelnosti a systému jakosti ve svařování jsou veškeré oceli, Al, Ni, Cu, Ti, Zr a jejich slitiny zařazeny do skupin pro potřeby svařování v souladu s **TNI CEN ISO/TR 15608**. Všechny oceli jsou podle této normy zařazeny do celkem 11 skupin. Číselné hodnoty stanovené u skupin 1 až 11 vycházejí z rozboru taveb těchto materiálů. Ocelí využívaných v energetickém strojírenství se týkají zejména skupin 4 až 10. Přiřazení oceli do příslušné skupiny či podskupiny závisí na obsahu základních prvků využívaných při označování slitin. V příloze 1.5. je uveden systém zařazení ocelí do skupin podle TNI CEN ISO/TR 15608.

V normě **ČSN EN 1011-2** týkající se obloukového svařování feritických ocelí, lze pak nalézt doporučení pro ruční, polomechanizované, mechanizované a automatizované obloukové svařování feritických ocelí s výjimkou feritických korozivzdorných ocelí. Tato norma je určena pro oceli zahrnuté ve skupinách 1 až 7 podle TNI CEN ISO/TR 15608.

Podle této normy se u žárovevých ocelí a ocelí pro nízké teploty musí při stanovení podmínek svařování používat postupy uvedené v kapitole C.4 této normy a týkající se eliminace vodíkového praskání. Hranice teploty předehřevu a interpass teploty jsou uvedeny v tabulce v příloze 1.6. Tato tabulka platí pro vybrané typy žárovevých ocelí spadajících do skupin 4, 5, 6 a 7 v souladu s TNI CEN ISO/TR 15608. Uvedené hodnoty platí pro tupé svary. U svarů s intenzivnějším odvodem tepla jsou někdy vyžadovány vyšší minimální teploty předehřevu. Pro porovnání je v příloze 1.7. uvedena tabulka experimentálně ověřených teplot předehřevu, interpass teplot a podmínek tepelného zpracování po svařování pro vybrané Cr-Mo oceli [92].

Tab. 4. Rozmezí hm. % prvků pro výpočet předehřevu dle ČSN EN 1011-2 (varianta A)

| | C | Si | Mn | Ni | Cr | Mo | V | Cu |
|------|----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|----------|-----------|
| min. | 0,05 | - | - | - | - | - | - | - |
| max. | 0,25 | 0,80 | 1,70 | 2,50 | 0,90 | 0,75 | 0,20 | 1,00 |

Norma ČSN EN 1011-2 dále uvádí dvě metody určené pro stanovení teploty předehřevu při svařování nelegovaných, jemnozrnných a nízkolegovaných ocelí. První z nich (metoda A) je použitelná, pokud jsou hodnoty uhlíkového ekvivalentu CE určeného podle vztahu (24) v rozsahu od 0,3 až do 0,7 %. Dále musí být u základního materiálu splněny podmínky chemického složení v souladu s tabulkou 4.

$$CE = C + \frac{Mn}{6} + \frac{Cr + Mo + V}{5} + \frac{Ni + Cu}{15} \quad (\%) \quad (24)$$

Teplota přehřevu T_P je pro příslušný uhlíkový ekvivalent C_E odečtena z grafů uvedených v normě na obrázcích C.2 a) až C.2 m). Tyto grafy v sobě zahrnují vliv kombinované tloušťky svaru, tepelného příkonu, obsahu difúzního vodíku a definovaného rozsahu uhlíkového ekvivalentu CE .

Druhá metoda (metoda B) je použitelná, pokud jsou hodnoty uhlíkového ekvivalentu CET určeného podle vztahu (25) v rozsahu hodnot od 0,2 až do 0,5. Dále musí být u základního materiálu splněny podmínky chemického složení v souladu s tabulkou 5.

$$CET = C + \frac{Mn + Mo}{10} + \frac{Cr + Cu}{20} + \frac{Ni}{40} \quad (\%) \quad (25)$$

Tab. 5. Rozmezí hm. % prvků pro výpočet přehřevu dle ČSN EN 1011-2 (varianta B)

| | C | Si | Mn | Ni | Cr | Mo | V | Cu | Nb | Ti |
|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| min. | 0,05 | - | 0,50 | - | - | - | - | - | - | - |
| max. | 0,25 | 0,80 | 1,90 | 2,50 | 1,50 | 0,75 | 0,18 | 0,70 | 0,06 | 0,12 |

Teplota přehřevu T_P je pak určena jako součet příspěvků dílčích parametrů zahrnujících vliv chemického složení vyjádřeného uhlíkovým ekvivalentem **CET** (0,2 až 0,5%), vliv tloušťky materiálu **d** (10 až 90mm), vliv obsahu difúzního vodíku **HD** (1 až 20 ml/100g) a vliv tepelného příkonu **Q** (0,5 až 4,0 kJ/mm). Celkový výpočtový vztah pro stanovení teploty přehřevu je vyjádřen rovnicí (26).

$$T_P = 697 \cdot C_{ET} + 160 \cdot \tanh\left(\frac{d}{35}\right) + 62 \cdot HD^{0,35} + (53 \cdot C_{ET} - 32) \cdot Q - 328 \quad (^\circ\text{C}) \quad (26)$$

Pro výpočet uhlíkového ekvivalentu, který charakterizuje náchylnost oceli na zakalení v teplem ovlivněné oblasti a tím i náchylnost na tvorbu trhlin za studena lze v odborné literatuře najít celou řadu vztahů, např. v [95,96,97]. Vypočtené uhlíkové ekvivalenty jsou často podkladem pro stanovení teploty přehřevu. Je však nutno dodat, že pro vysokolegované oceli nejsou k dispozici žádné obdobné ukazatele svařitelnosti, jako je uhlíkový ekvivalent.

Doporučení pro tavné svařování vysokolegovaných korozivzdorných ocelí lze nalézt v normě **ČSN EN 1011-3**. Tato norma platí pro korozivzdorné oceli austenitického, feritického, martenzitického a austeniticko-feritického typu zahrnutých ve skupinách 8 až 10 podle TNI CEN ISO/TR 15608. O tom jaká bude výsledná struktura vysokolegovaných korozivzdorných ocelí austenitického typu, rozhoduje vzájemné působení legujících feritotvorných a

austenitotvorných prvků vyjádřených pomocí tzv. chromového Cr_E a niklového Ni_E ekvivalentu. Na základě těchto ekvivalentů byly zkonstruovány konstituční diagramy, určené k odhadům výsledné struktury ocelí. Mezi nejvíce používané konstituční diagramy patří Schaefflerův, De Longův a WRC-1992 diagram uvedené v příloze 1.8. Podmínky pro svařování jednotlivých typů ocelí jsou uvedeny v informativních přílohách A, B, C a D normy ČSN EN 1011-3. V následujícím textu budou popsána obecná doporučení pro svařování ocelí jednotlivých typů.

Feritické korozivzdorné oceli obsahují mezi 10,5 až 30 % Cr a obsah C je do 0,08 %. Jednotlivé druhy těchto ocelí obsahují jeden nebo více z následujících prvků v maximálním množství do 4,5 % Mo; 1,6 % Ni; 2,1 % Al a 2,1 % Ti. Obsah intersticiálních prvků, především uhlíku a dusíku by měl být v těchto materiálech velice nízký a neměl by překročit 0,04 %. Snížení obsahu intersticiálních prvků ve feritických ocelích způsobí, že i v TOO svaru je dosaženo čistě feritické struktury. Takovéto oceli nejsou náchylné na vznik studených trhlin a svařují se obvykle bez předehřevu. K jejich stabilizaci se používá Ti, omezeně také Nb. Feritické korozivzdorné oceli jsou náchylné k nadměrnému růstu zrn, což způsobuje pokles vrubové houževnatosti. Pro svařování se proto vyžaduje co nejnižší tepelný příkon (malá svarová lázeň, vyšší rychlosti svařování). Svařují se menší tloušťky obvykle do 3 mm.

U feritických ocelí, u nichž není dodržen nízký obsah intersticiálních prvků, dochází v TOO také ke vzniku martenzitu. Proto se tyto oceli svařují s předehřevem 200 až 300°C. Pro stanovení výše teploty předehřevu nelze použít předchozí vztahy, proto se předehřev stanovuje experimentálně pomocí zkoušek praskavosti. V TOO v pásmu přehřátí materiálu lze očekávat zhrubnutí zrna způsobující zkřehnutí. Dalšími mechanismy způsobujícími zkřehnutí svarového spoje je zkřehnutí 475 a vznik σ -fáze [97]. Také zde se svařuje s limitovaným tepelným příkonem a používají se přídavné materiály s nízkým obsahem difúzního vodíku. Přídavné materiály jsou zpravidla stejného chemického složení, jako má základní materiál. Ke zlepšení plastických vlastností svarového spoje lze tyto přídavné materiály dolegovat 4 hm. % Ni, případně použít niklové slitiny. Po svařování obvykle následuje žíhání v rozmezí teplot 750 až 850°C zvyšující plastické vlastností a korozní odolnost svarového spoje. Pracovní teplota by u těchto ocelí a jejich spojů neměla překročit teplotu 320°C. V tom případě se není třeba obávat zkřehnutí 475, ani vzniku σ -fáze při provozním zatížení. Feritické oceli se svařují metodami MIG, MAG, TIG, obalenou elektrodou nebo plazmovým svařováním. Použít však lze po dohodě i metody jako je laserové a elektronové svařování nebo vysokofrekvenční odporové svařování.

Austeniticko-feritické korozivzdorné oceli, jinak známé také jako duplexní oceli, obsahují obvykle 21 až 28 % Cr; 3,5 až 8 % Ni; 0,1 až 4,5 % Mo a 0,05 až 0,35 % N. Některé druhy

těchto ocelí obsahují navíc Cu a W. Mají vyšší pevnostní vlastnosti než čistě feritické, nebo austenitické oceli, jsou mírně magnetické a nelze je zpevnit tepelným zpracováním [97]. S ohledem na možné zkřehnutí (475, σ -fáze) jsou využívány do teploty 300 °C. Tuhnou jako oceli feritické a proto nejsou téměř náchylné na vznik teplejších trhlin. Duplexní oceli se svařují bez předehřevu, nebo s předehřevem maximálně 100 až 150 °C a také tepelný příkon musí být v určitých mezích. Příliš nízký tepelný příkon vede ke zvýšení rychlosti ochlazování a ke zvýšení obsahu feritu. Příliš vysoký tepelný příkon naopak způsobuje precipitaci intermetalických fází. U nízko a středně legovaných druhů ocelí se svařuje s příkonem v rozsahu 0,5 až 2,5 kJ.mm⁻¹ a interpass teplotou nižší než 250 °C. U vysokolegovaných typů ocelí je tepelný příkon omezován na 0,2 až 1,5 kJ.mm⁻¹ s maximální interpass teplotou v rozsahu 100 až 150 °C.

Používají se přídavné materiály se zvýšeným obsahem niklu, jejichž úkolem je snížení obsahu feritu ve svarovém kovu na úroveň odpovídající základnímu materiálu a to i při intenzivním ochlazování svarového kovu. Duplexní oceli se obvykle tepelně nezpracovávají. Pro svařování jsou vhodné všechny běžné metody obloukového svařování, ale také laserové a elektronové svařování, nebo svařování elektrickým odporem.

Martenzitické korozivzdorné oceli obvykle obsahují Cr v rozmezí od 13 do 17 %; až 4 % Ni a až 1 % C. V závislosti na chemickém složení se jedná o oceli martenzitické, martenziticko-austenitické (mají méně než 0,1 % C a jejich struktura obsahuje 5 až 25 % austenitu v martenzitické matici) a na oceli martenzitické precipitačně vytvrzené (mají méně než 0,1 % C a jsou dolegovány prvky jako Cu, Ti, Nb, Al a Mo).

Největším problémem při svařování martenzitických ocelí je jejich prokalitelnost a náchylnost ke tvorbě studených trhlin. Při jejich svařování se proto zásadně používá předehřev, kontroluje se interpass teplota a může být vyžadován i dohřev [97]. Dříve se doporučovala teplota předehřevu vyšší než je M_s . V současnosti je pro martenzitické oceli s obsahem C větším než 0,1 % C volena teplota předehřevu mezi hodnotami M_f a M_s což zaručí ve struktuře dostatečné množství austenitu, ve kterém se rozpouští difúzní vodík a částečně jsou díky tomu snížena i vnitřní napětí. Teplota předehřevu je zpravidla volena v rozsahu teplot 200 až 300 °C, pro tlustostěnné díly a vysoce namáhané spoje může být požadován předehřev na ještě vyšší teplotu.

Jako přídavné se používají materiály stejného chemického složení a menších průměrů. Důvodem je snaha o vyžihání předchozí vrstvy v co největším objemu vrstvou následující. Také interpass teplota se zde předepisuje v rozmezí hodnot teplota předehřevu a M_s , zpravidla 20 až 50 °C nad hodnotou teploty předehřevu. Účelem dohřevu je umožnění následné difúze vodíku a snížení hodnoty vnitřních napětí. Ve svarovém kovu a především

v pásmu přehřátí TOO je u martenzitických ocelí limitující hodnotou požadovaných mechanických vlastností hodnota vrubové houževnatosti. Proto jsou svarové spoje těchto ocelí tepelně zpracovávány, zpravidla žíháním pod teplotou A_{c1} . Účelem je snížení vnitřních napětí a také popuštění martenzitu [97]. Doporučené rychlosti ohřevu na žíhací teplotu se podle tuhosti a tvarové složitosti konstrukce pohybují v rozmezí od 0,5 až do 2,5 °C.min⁻¹.

U martenziticko-austenitických ocelí není pro tloušťky ≤ 8 mm požadován předehřev. Pro větší tloušťky pak může být požadován předehřev v rozsahu teplot 100 až 200 °C [98]. Díky obsahu austenitu v martenzitické matici je dosaženo nižších hodnot pevnosti a tvrdosti, ale vyšších hodnot tažnosti. Přídavné materiály mají stejné chemické složení jako základní materiál.

Precipitačně vytvrzené martenzitické korozivzdorné oceli se svařují přídavnými materiály stejného chemického složení. Vzniku studených trhlin lze předejít zařazením předehřevu a v závislosti na typu slitiny může být nutné dodatečné žíhání po svařování [98]. Mohou se použít také austenitické přídavné materiály, potom ale nelze dosáhnout pevnosti odpovídající martenzitické oceli, značně se však sníží nebezpečí vodíkového praskání.

Pro svařování martenzitických ocelí se používají převážně metoda TIG a svařování obalenou elektrodou. Ve zvláštních aplikacích lze použít svařování pod tavidlem, plazmové svařování, nebo metody MIG a MAG [98].

Austenitické korozivzdorné oceli obsahují minimálně 16,5 % Cr a dostatečné množství Ni, Mn a N pro vytvoření austenitické struktury. Přestože je C prvkem se silným austenitizačním účinkem, je jeho obsah u standardních korozivzdorných ocelí limitován hodnotou 0,06% a u ocelí se zvýšenou korozní odolností dokonce hodnotou 0,015 %. Cílem redukce C je snížení tvorby karbidů chromu při svařování čímž se zabrání mezikrystalové korozi. Snížení obsahu C pod hodnotu 0,02 % je však obtížné, proto se do základního a přídavných materiálů přidávají tzv. stabilizační prvky jako je Ti, Nb nebo Ta s větší afinitou k uhlíku než chrom. Výhodný je také fakt, že karbidy titanu a niobu precipitují v celém objemu zrna a ne pouze na hranicích jak je tomu u karbidů chromu.

Standardní austenitické korozivzdorné oceli nejsou plně austenitické a při svařování se v nich může tvořit malé množství δ -feritu, což má vliv na jejich korozní odolnost. Řešením jsou proto vyšší obsahy již zmíněných stabilizačních prvků v přídavných materiálech. Pokud je chemické složení korozivzdorných ocelí upraveno tak, že je v nich dosaženo plně austenitické struktury, mluvíme o tzv. superaustenitech [98]. Tyto oceli mají zvýšený obsah Cr a Ni a jsou dolegovány prvky jako Mo, N, případně Cu.

Dále existují austenitické korozivzdorné oceli s upraveným chemickým složením, jejichž cílem je zlepšit konkrétní vlastnosti. Patří sem například austenitické oceli s vysokou

hodnotou meze kluzu legované až 0,45% dusíku, nebo žáruvzdorné austenitické oceli se zvýšeným obsahem Cr a Si a legované dalšími prvky jako jsou Mo, N, Ti, Nb, případně prvky vzácných zemin. Řadí se sem také austenitické oceli se zlepšenou obrobiteľností, mající zvýšený obsah S (0,35%) a obsahující další prvky jako je vápník a selen. [98]

Svařitelnost austenitických korozivzdorných ocelí je ovlivněna jejich náchylností k tvorbě teplých trhlin, nebezpečím vzniku mezikrystalové koroze způsobené precipitací karbidů Cr a možným zkřehnutím v důsledku σ -fáze. Tyto oceli se svařují přídavnými materiály se stejným, nebo podobným chemickým složením. Přídavné materiály jsou navrženy tak, aby bylo ve svarovém kovu dosaženo 3 až 15 % δ -feritu pro zvýšení odolnosti vůči teplým trhlinám. Obsahují obvykle více legur kompenzujících účinky segregace a ztráty legujících prvků propalem. Při svařování superaustenitů se používají přídavné materiály na bázi Ni, případně lze u ocelí s plně austenitickou strukturou použít svařovací materiály podobného chemického složení, ovšem s vyšším obsahem Mn pro snížení nebezpečí vzniku teplých trhlin.

Pro svařování lze použít téměř všechny známé technologie svařování zajišťující dokonalou ochranu svarového kovu. Svařuje se bez předehřevu, protože tyto materiály nelze zakalit. Navíc by předehřev mohl nepříznivě ovlivnit korozní odolnost svarového spoje a s většími hodnotami vneseného tepla vzrůstá nebezpečí deformací, praskání za tepla, zcitlivění a precipitace intermetalické fáze. Z těchto důvodů se také omezuje tepelný příkon do svaru na maximální hodnotu $1,5 \text{ kJ} \cdot \text{mm}^{-1}$ a interpass teplota na maximálně 150°C . Snížený tepelný příkon zároveň snižuje nebezpečí růstu zrn v pásmu přehřátí TOO. Při svařování v ochranných atmosférách se zpravidla používají inertní ochranné plyny. Při použití směsných plynů nesmí tyto plyny obsahovat více než 2,5% CO_2 , aby se snížilo nebezpečí nasycení materiálu uhlíkem.

5. Cíle habilitační práce

Z provedeného rozboru současného stavu poznání v oblasti numerických simulací svařování a tepelného zpracování a z rozboru problematiky vstupních dat numerických simulací vyplývá značná neucelenost metodik a postupů při získávání a ověřování těchto dat. Tato problematika je pro úzce specializované simulace a nekomerční simulační programy řešena individuálně jednotlivými výzkumníky s přihlédnutím ke konkrétní aplikaci. U komerčních programů se pak zpravidla vychází pouze z dostupných materiálových databází, přičemž nikde není uvedeno, jakým způsobem byla tato data získána a pro jaký rozsah aplikací je možné uvedená data, případně předdefinované modely využít. Navíc se většinou (zejména z důvodu ceny) provedou pouze dílčí měření požadovaných vstupních veličin pro konkrétně řešený problém, ale při aplikaci těchto dat na jiném typu řešených úloh pak dochází ke značným odchylkám od reality.

Jak bylo ukázáno v kapitole 2, oblast numerických simulací svařování a tepelného zpracování je velice široká a z pohledu získávání vstupních a verifikačních dat není možné pokrýt celou tuto oblast v rámci jedné práce s omezeným rozsahem. Proto je u předložené práce pozornost zaměřena zejména do oblasti simulací růstu zrna v TOO, do oblasti získávání vstupních a verifikačních dat při jednoznačném definování okrajových podmínek při svařování s předehřevem a bez předehřevu a do oblasti tepelného zpracování s cílem komplexního stanovení a popisu dějů na rozhraní zkušební vzorek – ochlazovací médium. Na základě uvedených skutečností proto byly definovány následující cíle habilitační práce:

1. Vytvořit a popsat metodický postup vedoucí k získání křivek kinetiky růstu zrna aplikovatelný pro komerční simulační programy. Na základě uvedené metodiky experimentálně stanovit hodnoty aktivační energie růstu zrna Q [$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$] a konstanty úměrnosti K_0 [$\text{mm}^2\cdot\text{s}^{-1}$] pro austenitické oceli HR3C, S304H a TP347HFG, martenzitickou ocel P92 a bainitickou ocel P24. Použít získané údaje k predikci velikosti zrna a porovnat je s realitou.
2. Vytvořit a popsat metodické postupy využitelné pro návrh a realizaci experimentů svařování žáropevných materiálů bez předehřevu i s předehřevem, s cílem získat vstupní data numerických simulací, při jednoznačném definování okrajových podmínek. Ukázat a popsat tyto postupy na konkrétních způsobech experimentů při svařování materiálů P235GH, 10GN2MFA a X22CrMoV12-1. Na základě dosažených výsledků modifikovat stávající výpočetní modely používané pro uvedený typ materiálů, zejména v oblasti predikce tvrdosti u bainitických a martenzitických ocelí.
3. Navrhnout a ověřit metodiku použitelnou ke stanovení teplotní závislosti součinitele přestupu tepla do kalícího média s ohledem na typ ochlazovacího média, druh základního materiálu a velikost kaleného předmětu.

6. Vlastnosti a popis materiálů použitých pro experimentální měření

V této kapitole jsou krátce popsány základní vlastnosti a oblasti použití u materiálů, na nichž byla realizována experimentální měření a které budou zmíněny v dalších kapitolách věnovaných jednotlivým typům experimentů. Všechny uvedené materiály jsou využívány v energetickém strojírenství a to jak v tepelných tak i v jaderných elektrárnách. Jednotlivé materiály jsou za sebou řazeny podle jejich základní struktury na austenitické (25Cr20NiNbN, 18Cr9Ni3CuNbN, 18Cr12NiNb), martenzitické (ASTM A705 – typ 630, X10CrWMoVNb9-2, X22CrMoV12-1), bainitické (7CrMoVTi10-10, 10GN2MFA) a feriticko-perlitické C-Mn oceli (P235GH).

6.1. Austenitická vysokolegovaná ocel 25Cr20NiNbN (HR3C)

Ocel 25Cr20NiNbN označovaná také jako HR3C patří do skupiny austenitických ocelí. Jedná se o nový typ oceli s vysokou odolností vůči teplotě, jež ji předurčuje k využití pro ohříváče, části tepelných zařízení, trubky a kotle. Její další výhodou je vysoká odolnost vůči korozi i za vyšších teplot. Oproti obdobným austenitickým materiálům (S304H, TP374HFG atd.) je materiál HR3C mnohem více legován Cr a Ni. Díky tomu se vyznačuje vysokou korozní odolností v prostředí páry. Rekrystalizace tohoto materiálu probíhá během tepelného zpracování, které následuje po deformaci za studena, při teplotách 650-900°C [101]. Tento proces ovlivňuje mechanické vlastnosti a provozní teplotu. Chemické složení oceli HR3C zjištěné pomocí spektrometru Q4 Tasman je uvedeno v tabulce 6.

Tab. 6. Chemické složení oceli HR3C [hm. %] zjištěné pomocí spektrometru Q4 Tasman

| C | Si | Mn | Cr | Mo | Ni | Co | N | Nb |
|------|------|------|-------|------|-------|------|------|------|
| 0,06 | 0,37 | 1,21 | 25,71 | 0,18 | 20,48 | 0,37 | 0,09 | 0,42 |

Mechanické vlastnosti oceli HR3C závisí na její mikrostruktuře a na množství precipitátů, které se během provozu v materiálu vytvářejí. [99] Základní struktura je austenitická s malými precipitáty NbCrN, MX, a $M_{23}C_6$. Díky tomu má ocel velmi dobrou teplotní stálost a korozní odolnost [101]. Při provozních podmínkách se vytvářejí další precipitáty především na hranicích zrn. K vylučování precipitátů dochází především během prvních 2000 hodin provozního zatížení, poté už jsou mikrostruktura oceli a mechanické vlastnosti téměř konstantní [99,100]. Tím je zajištěna velice dobrá teplotní stabilita při dalším provozu. V příloze 1.9. je uveden graf s křivkami meze pevnosti při tečení pro různé teploty. Přehled hlavních mechanických vlastností pak uvádí tabulka 7.

Tab. 7. Základní mechanické vlastnosti oceli HR3C [102]

| Mez kluzu $R_{p0,2}$ při 20°C [MPa] | Mez kluzu $R_{p0,2}$ při 650°C [MPa] | Mez pevnosti R_m při 20°C [MPa] | Prodloužení A_5 při 20°C [%] | Nárazová práce při 20°C [J] |
|---|--|---|--------------------------------------|-----------------------------------|
| ≥ 295 | 180 | 655 – 900 | ≥ 30 | 85 |

6.2. Austenitická vysokolegovaná ocel 18Cr9Ni3CuNbN (S304H)

Ocel 18Cr9Ni3CuNbN označovaná také jako Super 304H, patří do skupiny vysoko-legovaných austenitických ocelí typu 18%Cr-9%Ni. Z důvodu precipitačního zpevnění do ní byly přidány prvky jako je Cu, Nb a N. Jde o austenitickou ocel s kontrolovaným obsahem uhlíku, aby byla zajištěna její odolnost i při teplotách nad 550°C. Výhodou austenitické oceli S304H je její vysoká korozní odolnost jak v oxidačních tak i v redukčních prostředích. Nachází široké uplatnění při výrobě zařízení pro energetický průmysl, jako jsou přehřívačky, tepelné výměníky, trubky a další komponenty používané v USC elektrárnách. Do těchto ocelí se přidává 3% mědi, což umožňuje jejich dlouhodobé použití i při teplotách 600°C. [103] V příloze 1.10. je uveden graf s křivkami meze pevnosti při tečení pro různé teploty. Tento typ ocelí je využíván především v Evropě, USA a Japonsku a jsou známy pod zkráceným označením S304H. V tabulce 8 je uvedeno chemické složení oceli S304H zjištěné pomocí spektrometru Q4 Tasman.

Tab. 8 Chemické složení oceli S304H [hm. %] zjištěné pomocí spektrometru Q4 Tasman

| C | Si | Mn | Cr | Mo | Ni | Co | N | Nb | Cu | V |
|------|------|------|-------|------|------|------|------|------|------|------|
| 0,09 | 0,24 | 0,87 | 18,81 | 0,33 | 8,45 | 0,15 | 0,09 | 0,51 | 3,52 | 0,06 |

Přidání dusíku do oceli vede ke zpevnění materiálu a souvisí se zvýšením odolnosti materiálu proti namáhání tahem. Odolnost vůči tečení při podmínkách creepu je zvýšena vylučováním fáze bohaté na měď v základní matici [105]. Množství mědi se ve zpevňující fázi se průběhu precipitačního procesu mění, přičemž zvyšující se procento mědi je možné pozorovat v průběhu stárnutí materiálu při teplotách ±650°C. Během tohoto procesu ostatní prvky jako Fe, Cr, Ni difundují ven a narůstá tak obsah mědi [106]. Kromě této fáze dochází k současnému vylučování karbonitridů niobu, což má za následek intenzivní precipitační zpevnění. K tomu dochází postupně během provozního zatížení a po teplotní expozici odpovídající cca. 1000 hodinám dosahuje svého maxima. Při tomto zpevnění dosahuje tvrdosti až 246 HV a své vlastnosti si dále udržuje. To bylo ověřeno při provozních podmínkách při teplotě 650°C po dobu 8000 hodin [104]. Během teplotní expozice navíc dochází k difuzi chromu a rozšiřování povrchové vrstvy Cr_2O_3 . Tato vrstva poskytuje velice

dobrou odolnost proti oxidaci a snižuje ji na minimum. Přehled hlavních mechanických vlastností oceli uvádí tabulka 9. Další informace o mechanických vlastnostech po různých dobách provozního zatížení lze nalézt například v [107].

Tab. 9. Základní mechanické vlastnosti oceli S304H [102]

| Mez kluzu $R_{p0,2}$ při 20°C [MPa] | Mez kluzu $R_{p0,2}$ při 650°C [MPa] | Mez pevnosti R_m při 20°C [MPa] | Prodloužení A_5 při 20°C [%] | Nárazová práce při 20°C [J] |
|---|--|---|--------------------------------------|-----------------------------------|
| ≥ 235 | 135 | 590 - 850 | ≥ 35 | 85 |

6.3. Austenitická vysokolegovaná ocel 18Cr12NiNb (TP347HFG)

Ocel 18Cr12NiNb označovaná také jako TP347HFG, patří stejně jako ocel S304H do skupiny vysokolegovaných austenitických ocelí typu 18%Cr-9%Ni. Z důvodu precipitačního zpevnění do ní byly přidány niob a dusík. Ke zpevnění dochází také vylučováním stabilních karbidů Ti a Nb. Ocel TP347HFG se od základního typu TP347H liší aplikací termomechanického zpracování, které zajišťuje kvalitnější jemnozrnnou strukturu. Je také více odolná proti oxidaci v prostředí páry [108]. Chemické složení oceli TP347HFG je uvedeno v tabulce 10.

Tab. 10. Chemické složení oceli TP347HFG [hm. %] zjištěné spektrometrem Q4 Tasman

| C | Si | Mn | Cr | Mo | Ni | Co | N | Nb | Cu | V |
|------|------|------|-------|------|-------|------|------|------|------|------|
| 0,10 | 0,29 | 1,51 | 18,94 | 0,21 | 10,47 | 0,16 | 0,16 | 0,87 | 0,13 | 0,05 |

Ocel TP347HFG se využívá v chemickém a energetickém průmyslu u zařízení pracujících ve styku s oxidačním prostředím při vyšších teplotách, jako jsou přehříváky páry a parní potrubí [108]. Oceli se zpracovávají při vysokých teplotách v rozmezí teplot 1150-1200°C a následně jsou ochlazeny ve vodě, aby se předešlo precipitaci nových fází v průběhu ochlazování [107]. Ve srovnání s ocelmi TP304, TP321H a TP316H dosahuje vyšších hodnot pevností a vyšších mezí pevnosti při tečení. V příloze 1.11. je uveden graf s křivkami meze pevnosti při tečení pro různé teploty.

Kromě základního typu precipitátů $M_{23}C_6$ dochází k současnému vylučování karbonitridů niobu což má za následek intenzivní precipitační zpevnění. Během provozního zatížení postupně dochází k dalšímu precipitačnímu zpevnění. Primárně se vylučují karbidy niobu NbC o velikosti 1 – 3 μm , které jsou náhodně rozmístěny uvnitř zrna i na jeho hranicích. Po provozním zatížením přesahujícím 1000 hodin se v materiálu dále vylučují velmi jemné karbidy NbC a na chrom bohaté precipitáty typu $M_{23}C_6$. Po 1000 hodinách provozu se již pevnostní vlastnosti blíží své maximální hodnotě. Dále dochází již pouze k mírnému zpevnění, jehož

maximum se pohybuje okolo 5000 hodin provozního zatížení [107]. Přehled hlavních mechanických vlastností oceli TP347HFG uvádí tabulka 11.

Tab. 11. Základní mechanické vlastnosti oceli TP347HFG [102]

| Mez kluzu $R_{p0,2}$ při 20°C [MPa] | Mez kluzu $R_{p0,2}$ při 650°C [MPa] | Mez pevnosti R_m při 20°C [MPa] | Prodloužení A_5 při 20°C [%] | Nárazová práce při 20°C [J] |
|---|--|---|--------------------------------------|-----------------------------------|
| ≥ 205 | 126 | 550 - 750 | ≥ 35 | 85 |

6.4. Martenzitická vysokolegovaná ocel ASTM A705-typ 630

Ocel ASTM A705 - typ 630 je řazena do skupiny martenzitických nerezových vytvrditelných ocelí. Patří do skupiny ocelí označovaných UNS S17400, nebo jenom zkráceně 17-4, případně 17-4 PH. Její korozní odolnost je srovnatelná nebo vyšší než u většiny standardních vytvrditelných nerezových ocelí a pro většinu prostředí a médií je srovnatelná s austenitickými nerezovými oceli typu 304 [111]. Velmi dobrých mechanických vlastností je u ocelí tohoto typu dosaženo tepelným zpracováním s následným precipitačním vytvrzením. V závislosti na způsobu vytvrzení je možné dosáhnout u těchto ocelí mezí pevnosti od 930 do 1310 MPa. Tento typ ocelí se používá především pro komponenty tepelných motorů, vrtulových kol, rotorů, matric zařízení pro vstřikování plastů a také ventilů a hnacích kol tepelných strojů [110,111]. V tabulce 12 je uveden interval chemického složení pro oceli A705 – typ 630.

Tab. 12. Chemické složení oceli ASTM A705 - typ 630 [hm. %] [109]

| | C | Mn | Si | P | S | Cr | Ni | Cu | Nb+Ta |
|------|------|-----|-----|------|------|------|-----|-----|-------|
| min. | - | - | - | - | - | 15,0 | 3,0 | 3,0 | 0,15 |
| max. | 0,07 | 1,0 | 1,0 | 0,04 | 0,03 | 17,5 | 5,0 | 5,0 | 0,45 |

Vlastní tepelné zpracování se u tohoto typu ocelí skládá z ohřevu na teplotu 1065°C a z následného ochlazení na vzduchu na teplotu okolí. Díky tomu je získána martenzitická struktura s poměrně dobrými hodnotami pevnosti a tvrdosti. Tento způsob zpracování se označuje písmenem A. Dalšího zvýšení pevnostních vlastností je dosaženo následným vytvrzováním. V tabulce 13 jsou ukázány používané způsoby vytvrzování tohoto typu oceli, včetně dosažených mechanických hodnot [112]. Uvedené vysoké hodnoty mechanických vlastností jsou stále přibližně do teplot 315°C.

Při precipitaci se formují koherentní precipitáty Cu. Ty vznikají v průběhu tepelného zpracování a vytvrzování před vlastním provozním zatížením. Při dlouhodobém vystavení teplotám v rozmezí teplot 370 až 480°C dochází k transformaci těchto částic na nekoherentní

částice Cu s plošně středěnou mřížkou. Navíc dochází k rozpadu martenzitu na ferit a na Cr bohaté fáze α . To vede ke ztrátě houževnatosti [113]. V případě, že jsou tyto oceli vytvrzovány při teplotě 550°C a více, dosahují dobré odolnosti vůči koroznímu praskání.

Tab. 13. Používané způsoby vytvrzování oceli ASTM A750 – typ 630 [112]

| Označení typu | Teplota výdrže [°C] | Délka výdrže [hod] | Typ ochlazení | Mez kluzu [MPa] | Mez pevnosti [MPa] | Tvrdost HRC |
|---------------|---------------------|--------------------|---------------|-----------------|--------------------|-------------|
| H900 | 480 | 1 | Vzduch | 1170 | 1310 | 43 |
| H925 | 495 | 4 | Vzduch | 1070 | 1170 | 41 |
| H1025 | 550 | 4 | Vzduch | 1000 | 1070 | 38 |
| H1075 | 580 | 4 | Vzduch | 860 | 1000 | 31 |
| H1100 | 595 | 4 | Vzduch | 790 | 965 | 29 |
| H1150 | 620 | 4 | Vzduch | 725 | 930 | 28 |

Oceli lze svařovat s využitím všech konvenčních svařovacích metod, přičemž přehřev nebývá požadován. Preferovány jsou především metody svařování TIG a MIG. Používají se přídavné materiály stejného chemického složení, jako je základní materiál. Po svařování je většinou vyžadováno tepelné zpracování a vytvrzení k získání požadovaných vlastností.

6.5. Martenzitická vysokolegovaná ocel X10CrWMoVNb9-2 (P92)

Ocel označovaná X10CrWMoVNb9-2 patří do skupiny martenzitických 9-12 % Cr ocelí. Jedná se o (9% Cr, 1,75% W, 0,5% Mo) ocel legovanou vanadem a niobem s řízeným obsahem bóru a dusíku. Je výsledkem japonského výzkumu a její původní označení bylo podle výrobce Nippon Steel Corporation NF 616. Podle ASTM se tato ocel zavedla pod celosvětově známým označením P92 [114]. Jde o modifikaci oceli P91 dolegováním 1,7 hm. % W, čímž je docíleno substitučního zpevnění tuhého roztoku vedoucí ke zvýšení žáropevnosti [116]. Dalšího zvýšení odolnosti proti creepu je dosaženo legováním dusíkem a také precipitací nitridu vanadu uvnitř zrna. Mikrostrukturní stabilitu této oceli pozitivně ovlivňuje malá rychlost hrubnutí částic typu $M_{23}C_6$, která úzce souvisí s rozpouštěním atomů bóru v dané fázi. V průběhu creepového zatížení totiž dochází k růstu a následně ke zhrubnutí těchto částic. Rychlost hrubnutí karbidů typu $M_{23}C_6$ roste se zvyšujícím se obsahem chromu v ocelích. Při teplotní expozici dochází také k precipitaci Lavesovy fáze bohaté na W a Mo [116]. V tabulce 14 je uvedeno chemické složení oceli P92 zjištěné pomocí spektrometru Q4 Tasman.

Tab. 14. Chemické složení oceli P92 [hm. %] zjištěné pomocí spektrometru Q4 Tasman

| C | Si | Mn | Cr | Mo | W | V | N | Nb |
|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| 0,10 | 0,25 | 0,41 | 8,94 | 0,43 | 1,69 | 0,19 | 0,06 | 0,06 |

Hayashi ve své práci [115] uvádí, že oceli P92 jsou vytvořeny pro použití v USC elektrárnách pro práce v rozmezí teplot 600 – 620°C a tlacích kolem 26 MPa. Jsou velice rozšířeny u parních systémů pracujících v kombinovaném cyklu. Důvodem je jejich vysoká teplotní stabilita a odolnost vůči teplotní únavě při ohřevu a ochlazování [115]. Vzhledem k vysokému obsahu chromu a přítomnosti dalších legujících prvků se křivky rozpadu austenitu v ARA diagramech posouvají k dlouhým časům a proto jsou tyto oceli prokalitelné i v tlustších průřezech při ochlazování na vzduchu. Vysoký obsah chromu navíc příznivě ovlivňuje korozní odolnost. V příloze 1.12. je uveden ARA diagram oceli P92 [117]. V příloze 1.13. je uveden graf s křivkami meze pevnosti při tečení pro teploty 600, 625 a 650°C [118]. Přehled hlavních mechanických vlastností oceli P92 je uveden v tabulce 15.

Tab. 15. Základní mechanické vlastnosti oceli P92 [102]

| Mez kluzu $R_{p0,2}$ při 20°C [MPa] | Mez kluzu $R_{p0,2}$ při 650°C [MPa] | Mez pevnosti R_m při 20°C [MPa] | Prodloužení A_5 při 20°C [%] | Nárazová práce při 20°C [J] |
|---|--|---|--------------------------------------|-----------------------------------|
| ≥ 440 | 248 | 620 – 850 | ≥ 19 | 40 |

6.6. Martenzitická vysokolegovaná ocel X22CrMoV12-1

Ocel X22CrMoV12-1 je v souladu s normou ČSN EN 10302 řazena do skupiny 9 – 12% Cr martenzitických ocelí. Jedná se o nerezovou vysoce legovanou ocel určenou pro aplikační použití při teplotách do 600°C. Byla vyvinuta v roce 1950 pro oblast energetického průmyslu a je často využívána na komponenty parních turbín, jako jsou lopatky, rotory a kompresory. Může být ale využívána i v dalších rozličných aplikacích s vysokou pracovní teplotou, jako je tomu například u pohonných částí letadel. Chemické složení této oceli zjištěné pomocí spektrometru Q4 Tasman je uvedeno v tabulce 16.

Tab. 16. Chemické složení oceli X22CrMoV12-1 [hm. %] zjištěné spektr. Q4 Tasman

| C | Si | Mn | Cr | Mo | Ni | V | P | S |
|------|------|------|-------|------|------|------|------|------|
| 0,21 | 0,25 | 0,68 | 11,72 | 0,83 | 0,63 | 0,34 | 0,02 | 0,01 |

Tento typ ocelí nabízí velmi dobrý poměr mezi pevnostními vlastnostmi a odolností vůči oxidaci za vysokých teplot a to při relativně nízké ceně a dobré technologické zpracovatelnosti. Lze u nich pozorovat nárůst hodnoty meze pevnosti při tečení během provozního zatížení. To umožňuje další zvýšení provozních parametrů energetických zařízení [119]. Vzhledem k vyššímu obsahu chromu se jedná o samokalitelnou ocel s martenzitickou strukturou a s velmi dobrou korozní odolností. Nejlepší korozní odolnosti je dosaženo na zušlechtném materiálu. Odolnost vůči creepu je způsobena martenzitickou

strukturou substitučně zpevněnou molybdenem, jehož velké atomy zhoršují pohyb dislokací. Dále pak zpevněním struktury způsobeném precipitací karbidů, zejména karbidů typu $M_{23}C_6$. ARA diagram oceli X22CrMoV12-1 [121] je uveden v příloze 1.14. Při svařování této oceli je vyžadován předeřhřev minimálně 200°C a také je zde požadavek na dodržení zvolené teploty.

Tab. 17. Doporučené způsoby tepelného zpracování oceli X22CrMoV12-1

| Způsob tepelného zpracování | Teplota [°C] | Způsob ochlazování |
|-----------------------------|--------------|--|
| Žíhání na měkko | 750 – 780 | Ochlazení v peci |
| Kalení | 1020 – 1070 | Ochlazení v oleji, nebo na vzduchu |
| Popouštění 1. způsob | 680 – 740 | Výdrž min. 2 h, ochlazení na vzduchu QT1 ($R_m = 800 - 950$ MPa) |
| Popouštění 2. způsob | 660 – 720 | Výdrž min. 2 h, ochlazení na vzduchu QT2 ($R_m = 800 - 950$ MPa) |

V tabulce 17 jsou uvedeny podmínky doporučeného tepelného zpracování této oceli a v tabulce 18 jsou uvedeny získané mechanické vlastnosti pro různé způsoby zušlechťení. Jak již bylo řečeno ocel X22CrMoV12-1 je vhodná pro použití za teploty do 600°C, přičemž její mez pevnosti při tečení dosahuje pro tuto teplotu a teplotní expozici 10^5 hodin hodnoty 59 MPa [120]. V tabulce v příloze 1.15. jsou uvedeny hodnoty meze tečení pro plastické prodloužení 1% a meze pevnosti při tečení pro teplotní expozici 10^4 a 10^5 hodin a pro teplotní rozsah 450 až 600°C [122].

Tab. 18. Minimální mechanické vlastnosti oceli X22CrMoV12-1 po zušlechťení

| Měřená veličina | Zušlechťeno na QT1 | Zušlechťeno na QT2 |
|---------------------------------|--------------------|--------------------|
| Min. mez kluzu $R_{p0,2}$ [MPa] | 600 | 700 |
| Min. mez pevnosti R_m [MPa] | 800 – 950 | 900 – 1050 |
| Min. tažnost A_5 [%] | 14 | 11 |
| Min. kontrakce Z [%] | 40 | 35 |
| Min. nárazová práce KV [J] | 27 | 20 |

6.7. Bainitická nízkolegovaná ocel 7CrMoVTi10-10 (P/T24)

Ocel 7CrMoVTi10-10 patří do skupiny nízkolegovaných a modifikovaných žárovevných ocelí. Tato ocel je spíše známa jako P24 nebo T24 a patří mezi Cr-Mo-V oceli legované dalšími prvky jako jsou (Ti, Nb, N a B). Patří mezi materiály s nižší výrobní cenou a poměrně dobrými pevnostními vlastnostmi v oblasti creepového namáhání. U těchto materiálů jsou

hlavními požadavky dostatečně vysoká mez pevnosti při tečení v kombinaci s vyhovující úrovní plasticity a dobrou korozní odolností v podmínkách tečení. Neméně důležitá je také dobrá technologická zpracovatelnost především svařitelnost. Tyto vlastnosti předurčují ocel P24 k využití v rozličných aplikacích energetického průmyslu, jako je oblast výroby a distribuce tepelné energie. Tyto materiály se využívají k výrobě membránových stěn, tlakových nádob, parních turbín, a dalších tepelných strojů jako jsou kotle, jejich části a různé tepelné armatury [123]. Kromě využití pro tenkostěnné kotlové trubky jsou tyto oceli vhodné i pro silnostěnné komponenty. Ocel T/P 24 byla navržena pro svařování bez požadavku na následné tepelné zpracování svarových spojů. Mohyla však ve své práci [160] potvrdil sekundární vytvrzování u svarů, které nebyly popuštěny. V tabulce 19 je uvedeno charakteristické rozmezí chemického složení pro tento typ ocelí.

Tab. 19. Chemické složení oceli T/P24 [hm. %] dle standardu ASTM A213 [124]

| | C | Mn | Si | P | S | Cr | Mo | V | B |
|------|----------|-----------|-----------|----------|----------|-----------|-----------|----------|----------|
| min. | 0,05 | 0,30 | 0,15 | - | - | 2,20 | 0,70 | 0,20 | 0,0015 |
| max. | 0,10 | 0,70 | 0,45 | 0,02 | 0,01 | 2,60 | 1,10 | 0,30 | 0,0070 |

Žáropevné vlastnosti nízkolegovaných a modifikovaných ocelí jsou určovány především jejich chemickým složením a dosaženou mikrostrukturou. Vlastní chemické složení těchto ocelí má velký vliv na výslednou mikrostrukturu, ale ta do značné míry závisí na tepelném zpracování. To obnáší normalizační žhání a popouštění. Během výdrže na popouštěcí teplotě dochází k precipitaci karbidů a karbonitridů vanadu a také částic MX, kde M znamená V, případně Ti a X znamená C nebo CN. Účelem popouštění je stabilizace struktury a dosažení přiměřených plastických vlastností. Struktura oceli je po základním tepelném zpracování čistě bainitická a obsahuje karbidy typu $M_{23}C_6$, M_7C_3 a MX [125]. Vliv má také přídavek molybdenu, substitučně zpevňujícího tuhý roztok. V příloze 1.16. je uveden graf s hodnotami závislosti meze pevnosti při tečení pro teploty 500, 550 a 600°C a v příloze 1.17. je ARA diagram oceli P24 [126]. Přehled hlavních mechanických vlastností oceli P24 je uveden v tabulce 20.

Tab. 20. Základní mechanické vlastnosti oceli P24 [127]

| Mez kluzu $R_{p0,2}$ při 20°C [MPa] | Mez pevnosti R_m při 20°C [MPa] | Prodloužení A_5 při 20°C [%] | Nárazová práce při 20°C [J] | Tvrdost Brinell [HB] |
|---|---|--|--|---|
| ≥ 450 | 565 – 840 | ≥ 17 | ≥ 40 | 40 |

6.8. Bainitická nízkolegovaná ocel 10GN2MFA

Ocel 10GN2MFA je nízkolegovaná ocel s bainitickou strukturou, která je využívána jako materiál pro výrobu energetických celků jaderných elektráren jako jsou pláště a tělesa primárních kolektorů parogenerátorů [129], zejména pro reaktory typu WWER-1000. Je charakteristická poměrně vysokou žáropevností a zároveň velmi dobrou plasticitou. První oceli tohoto typu byly vyráběny s chemickým složením odpovídajícím tabulce 21.

Tab. 21. Chemické složení prvních typů ocelí 10GN2MFA

| | C | Mn | Si | P | S | Cr | Mo | Ni | V |
|------|----------|-----------|-----------|----------|----------|-----------|-----------|-----------|----------|
| min. | 0,08 | 0,80 | 0,17 | - | - | - | 0,40 | 1,80 | 0,03 |
| max. | 0,12 | 1,10 | 0,37 | 0,02 | 0,02 | 0,03 | 0,70 | 2,30 | 0,07 |

U těchto materiálů však při provozním zatížení docházelo ke vzniku trhlin iniciovaných korozí pod napětím [128]. Trhliny se začaly objevovat v rozmezí mezi 7000 až 60 000 hodinami provozu. Důvodem jejich vzniku byl postup výroby oceli, při kterém docházelo k tvorbě lokálních koncentrací nečistot, včetně sulfidů manganu, majících vliv na vznik trhlin při korozí pod napětím [128]. Proto došlo k modifikaci výroby této oceli, zejména u materiálů používaných na parogenerátory. V současnosti se používají dvě metody výroby této bainitické oceli. První z nich, používaná v Rusku, vyžaduje použití technologie elektrostruskového přetavení, druhou je klasická standardní technologie využívající elektrické obloukové pece s následující rafinací v pánvi, vakuovým odplyněním a litím spodem s ochranou lícího proudu pomocí inertního plynu [129]. Ta je využívána například v České republice ve firmě Vítkovice Heavy Machinery. Oba uvedené způsoby výroby umožňují garantovat obsah fosforu pod 0,01% a síry pod 0,005%. U takto vyráběných ocelí ke vzniku trhlin iniciovaných korozí pod napětím prozatím nedošlo. Jak uvádí práce [129] křehkolomové vlastnosti by bylo možné u této oceli vylepšit pomocí interkritického žhání, jež se jeví alternativou k finančně náročné vakuové výrobě této oceli. Chemické složení oceli 10GN2MFA vyrobené ve firmě Vítkovice Heavy Machinery a zjištěné spektrometrem Q4 Tasman je uvedeno v tabulce 22.

Tab. 22. Chemické složení oceli 10GN2MFA zjištěné spektrometrem Q4 Tasman

| C | Mn | Si | P | S | Cr | Mo | Ni | V | Cu |
|----------|-----------|-----------|----------|----------|-----------|-----------|-----------|----------|-----------|
| 0,12 | 0,95 | 0,22 | 0,007 | 0,003 | 0,04 | 0,58 | 1,20 | 0,05 | 0,05 |

Jak je zřejmé z naměřeného ARA diagramu uvedeného v příloze 1.18., při rychlostech ochlazování odpovídajících svařování bude struktura oceli bainitická. Pouze při rychlostech ochlazování převyšujících $100^{\circ}\text{C}\cdot\text{s}^{-1}$ může být dosaženo martenzitické struktury [130].

Ocel 10GN2MFA je možné svařovat většinou konvenčních metod svařování, přičemž nejvíce používané jsou metody MAG, TIG, svařování obalenou elektrodou a svařování pod tavidlem. Pokud je svařovaný materiál perlitický, předehřev většinou není požadován. Při svařování materiálu v bainitickém stavu se předehřevy využívají. V tabulce 23 jsou uvedeny mechanické vlastnosti materiálu 10GN2MFA pro teplotu okolí a teplotu 350°C [131].

Tab. 23. Základní mechanické vlastnosti oceli 10GN2MFA [131]

| Teplota [°C] | Mez kluzu $R_{p0,2}$ [MPa] | Mez pevnosti R_m [MPa] | Prodloužení A_5 [%] | Nárazová práce KCV [J.cm ²] |
|-----------------|-------------------------------|-----------------------------|--------------------------|--|
| 20 | ≥ 343 | ≥ 539 | ≥ 16 | 59 |
| 350 | ≥ 294 | ≥ 490 | ≥ 14 | 39 |

5.4.9. Feriticko perlitická C-Mn ocel P235GH

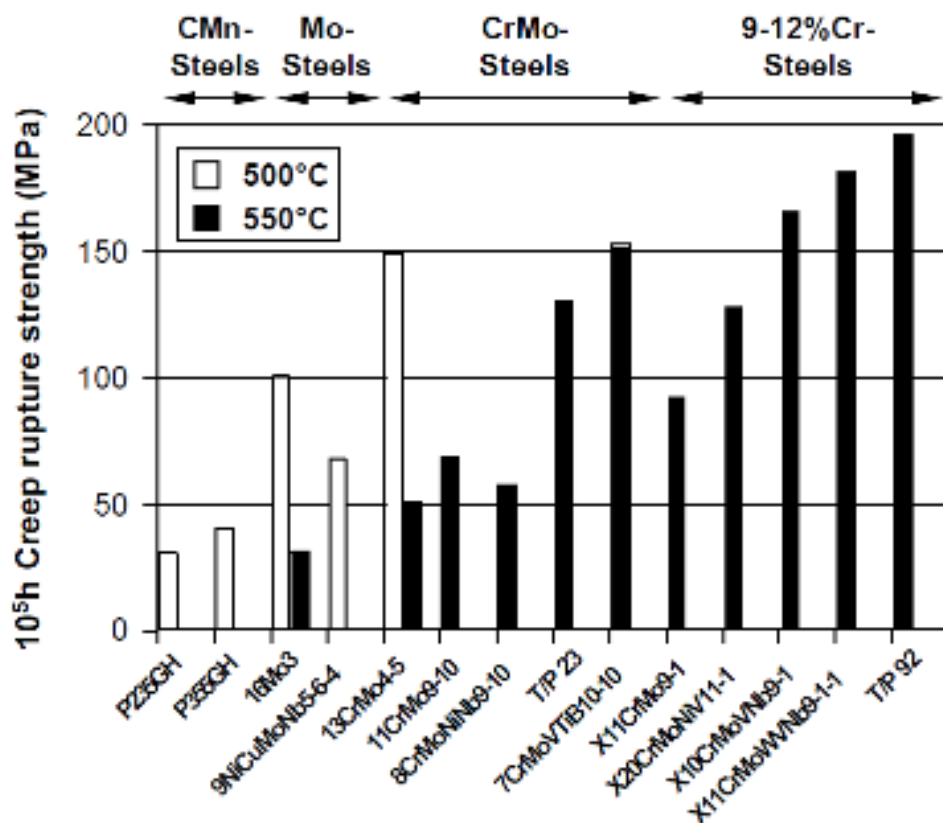
Ocel P235HG je řazena mezi creepově odolné C-Mn oceli s feritickou a perlitickou strukturou. Mechanické vlastnosti a zejména pevnostní vlastnosti této oceli jsou závislé na obsahu uhlíku a manganu [133]. Chemické složení předurčuje tuto ocel pro aplikace, kde pracovní teplota dlouhodobě nepřekročí teplotu 450°C. Proto je využívána především na výrobu parních kotlů, tlakových nádob, tepelně zatěžovaných potrubí atd. Chemické složení této oceli je uvedeno v tabulce 24.

Tab. 24. Chemické složení oceli P235GH odečtené z materiálového atestu

| C | Mn | Si | P | S | Cr | Mo | Ni | V | Nb | Cu |
|------|------|------|------|------|------|------|------|-------|-------|------|
| 0,15 | 0,48 | 0,22 | 0,02 | 0,01 | 0,06 | 0,01 | 0,03 | 0,003 | 0,002 | 0,30 |

Tento typ materiálu má nižší pevnostní vlastnosti při teplotě okolí, ale poměrně dobré meze pevnosti při tečení za vyšších teplot. Na obrázku 17 je ukázáno porovnání meze pevnosti při tečení pro vybrané typy C-Mn, Mo, Cr-Mo a 9-12% Cr ocelí.

Minimální mez kluzu oceli P235GH je 235 MPa při tloušťkách menších než 16 mm. Při použití větších tloušťek material se minimální mez kluzu snižuje (cca. 225 MPa). Mez pevnosti v tahu se pohybuje v rozmezí 360 až 480 MPa a minimální tažnost je u této oceli 24%. Hodnota vrubové houževnatosti je 40 J při pokojové teplotě 20°C. Ocel P235GH je svařitelná pomocí všech obvyklých metod svařování [134]. V tabulce 25 jsou uvedeny mezní hodnoty meze pevnosti při tečení R_{mT} pro 10^4 , 10^5 a $2,10^5$ hodin v teplotním intervalu 180 - 480 °C. Více o testování této oceli pro konkrétní aplikace je možné se dozvědět například v [135].



Obr. 17. Závislost meze pevnosti při tečení (10^5 hodin) na pracovní teplotě [133]

Tab. 25. Hodnoty meze pevnosti při tečení R_{mT} pro 10^4 , 10^5 a $2 \cdot 10^5$ hodin [132]

| Temp. [°C] | 380 | 390 | 400 | 410 | 420 | 430 | 440 | 450 | 460 | 470 | 480 |
|-------------------------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| $R_{mT} / 10^4$ | 229 | 211 | 191 | 174 | 158 | 142 | 127 | 113 | 100 | 86 | 75 |
| $R_{mT} / 10^5$ | 165 | 148 | 132 | 118 | 103 | 91 | 79 | 69 | 59 | 50 | 42 |
| $R_{mT} / 2 \cdot 10^5$ | 145 | 129 | 115 | 101 | 89 | 78 | 67 | 57 | 48 | 40 | 33 |

7. Numerické simulace velikosti austenitického zrna

V posledních několika letech je zřejmá snaha o co nejpřesnější matematický popis chování materiálů při jejich teplotním a napětovém zatížení. Kromě běžně predikovaných veličin jako jsou teplotní a deformační pole v prostoru a čase, se stále častěji objevují požadavky na predikci velikosti austenitického zrna. To se týká jak simulací zhrubnutí zrna v přehřáté TOO svarů, tak také simulací růstu zrna při tepelném zpracování rozměrnějších dílů. Velikost zrna je totiž významným materiálovým parametrem ovlivňujícím nejen křehkolomové a pevnostní vlastnosti, ale také průběh transformačních pochodů, creepovou a únavovou odolnost, nebo elektrické a magnetické vlastnosti [139].

$$R_e = \sigma_0 + k \cdot D_{střední}^{-1/2} \quad (27)$$

Například vliv velikosti zrna na mez kluzu R_e je dán Hall-Petchovou rovnicí (27), kde $D_{střední}$ je střední (průměrná) velikost zrna, σ_0 je napětí při kterém dochází v materiálu k pohybu dislokací a k je koeficient zpevnění charakteristický pro každý materiál [32]. Hodnoty k a σ_0 jsou pro vybrané materiály uvedeny v tabulce 26.

Tab. 26. Hodnoty k a σ_0 pro vybrané materiály [141]

| Materiál | Měď | Titan | Uhlíková ocel | Ni ₃ Al |
|-----------------------------|------|-------|---------------|--------------------|
| σ_0 [MPa] | 25 | 80 | 70 | 300 |
| k [MPa.m ^{1/2}] | 0,11 | 0,40 | 0,74 | 1,70 |

Termodynamickou hnací silou růstu zrn je snížení Gibsovy volné povrchové energie na hranicích zrn. Při zvýšených teplotách jsou menší zrna postupně pohlcována zrn timerostoucími, proto celkový počet zrn klesá. Postupným snižováním plochy pohlcovaných zrn se zároveň snižuje i celková povrchová energie, což přispívá k dalšímu růstu zrn [32]. Při růstu zrna se uplatňují následující základní pravidla:

- K růstu zrn dochází pohybem hranic zrn a ne srůstáním.
- Pohyb hranice zrna je přerušovaný a směr pohybu se může náhle změnit.
- Zrno může růst do jiného na úkor jeho objemu.
- Míra spotřeby zrn na úkor jiných se často zvyšuje, když jsou zrna téměř spotřebována.
- Zakřivená hranice obvykle migruje ke svému středu křivosti.
- Pokud se hranice zrn jedné fáze setkávají v úhlech jiných než 120 stupňů, zrna s hranicí s ostrým úhlem se spotřebují tak, aby se úhel blížil 120 stupňům.

Růstem vybraných zrn, při němž dochází k pohlcení menších zrn, se v průběhu času zvětšuje průměrná velikost zrna. Proto je střední průměr, nebo středí plocha zrna používána

jako míra velikosti zrna u slitin. Základní výpočty predikující velikost zrna vycházejí z rovnice ideálního růstu zrna (28)

$$D^2 - D_0^2 = Kt \quad (28)$$

kde D je aktuální velikost zrna, D_0 je počáteční velikost zrna, K je konstanta úměrnosti (kinetická konstanta) závislá na teplotě ohřevu a aktivační energii a t je čas výdrže na dané teplotě [140]. Tato rovnice je využívána především při simulacích, kdy se předpokládá, že systém nemá žádné vady a neobsahuje precipitáty. Růst zrn je tak řízen pouze difúzí. V případech, kdy se v materiálech objevují mechanismy zpomalující kinetiku růstu austenitického zrna, se rovnice ideálního růstu zrna zobecňuje nahrazením exponentu rovného dvěma variabilním exponentem m , tak jak je ukázáno v rovnici (29). Rovnice (30) definuje vztah mezi konstantou úměrnosti K a teplotou T , při níž dochází k růstu zrna [140].

$$D^m - D_0^m = Kt \quad (29)$$

$$K = K_0 e^{-\frac{Q}{RT}} \quad (30)$$

Také zde je D aktuální velikost zrna, D_0 je počáteční velikost zrna a K je konstanta úměrnosti. T je teplota výdrže, Q je aktivační energie potřebná k růstu zrna, K_0 je materiálová konstanta a je získána experimentálně společně s aktivační energií. R je plynová konstanta, t je čas výdrže na dané teplotě a m je exponent závislý na způsobu růstu zrna. Bylo experimentálně prokázáno, že hodnoty exponentu m leží v rozmezí hodnot 2 až 5 [33]. V ideálním případě je růst zrn řízen pouze difúzí. V takovém případě je exponent $m = 2$ a pro simulační výpočet je použita rovnice ideálního růstu zrna (28). Dále může být růst zrn řízen například difúzí společně s precipitující fází v rostoucích zrnech, potom je exponent $m = 3$. Pokud se projevuje společný účinek precipitace a difúze podél hranic zrn, pak je exponent $m = 4$ [33]. V případě, že je růst zrn ovlivněn především precipitací, exponent se blíží k hodnotě $m = 5$. Volba koeficientu m je poměrně obtížná a závisí především na druhu materiálu. Proto je vhodné (a někdy i nezbytné) provést ověřující experimenty, potvrzující vhodnost navrženého koeficientu m pro daný typ výpočtu.

Jak již bylo uvedeno v rešeršní části kapitoly 2, k simulacím růstu zrn je téměř výhradně používána metoda Monte Carlo s Pottsovým zobecněním. V následujících kapitolách proto bude popsán princip této metody, způsob výpočtu velikosti austenitického zrna pomocí komerčních simulačních programů a experimentální postupy využívané při stanovení velikosti zrna. Dále zde budou popsány metodické postupy určené pro stanovení vstupních veličin Q a K_0 nezbytných při stanovení konstanty úměrnosti K . Použití uvedených veličin bude demonstrováno při numerických simulacích svařovacích cyklů i při dějích s dlouhými

expozičními teplotami, včetně porovnání výsledků s reálnými experimenty. Metodické postupy byly aplikovány na austenitické oceli HR3C, S304H a TP347HFG, martenzitickou ocel P92 a bainitickou ocel P24.

7.1. Popis metody Monte Carlo Potts (MCP)

Metoda Monte Carlo je metodou založenou na teoriích pravděpodobnosti a matematické statistice. Je využívána především pro počítačové implementace popisu změn nenáhodných dějů pomocí stochastických metod pracujících s pseudonáhodnými čísly. Patří do oblasti optimalizačních algoritmů hledajících minimum dané účelové funkce. Zjednodušeně řečeno, metoda se snaží určit střední hodnotu veličiny, která je výsledkem náhodného, nebo pseudonáhodného děje. [30,31]

Zjednodušená podstata metody Monte Carlo byla známa již v 18 století a byla praktikována pod názvem statistické vzorkování. Zásluhy za rozvoj této metody jsou ale přisuzovány Stanislawu Marcin Ulamovi a Johnu von Neumannovi. Ti spolu nejprve během druhé světové války spolupracovali na projektu Manhattan a posléze se v americké Národní laboratoři Los Alamos věnovali výzkumu chování neutronů. Zajímalo je především, jaké množství neutronů projde různými druhy materiálů. Přes velké množství informací nebylo v té době možné problém vyřešit teoreticky ani prakticky. K výslednému řešení dopomohla až metoda Monte Carlo, ve které se oba vědci nechali inspirovat kolem rulety představující materiál a poskakující kuličkou simulující pohyb neutronu materiálem (proto název Monte Carlo). Z jimi provedených výzkumů bylo známo, že k pohlcení neutronu jiným atomem dochází přibližně v jednom případě ze sta. Každé roztočení rulety by tak představovalo pohyb neutronu prostředím a opakovalo by se tak dlouho, dokud by se kulička nezastavila na políčku znázorňujícím pohlcení neutronu, nebo do okamžiku simulujícího úspěšný průchod neutronu materiálem. Přestože je uvedený příklad velmi zjednodušený, vystihuje podstatu metody Monte Carlo. [30]

Stochastické metody hrají velkou roli téměř ve všech oblastech lidského konání (termodynamika, fyzika, matematika, informatika, meteorologie, biologie, medicína, umělá inteligence, životní prostředí atd.), proto má také metoda Monte Carlo širokou možnost využití. Obecně se dá říci, že je možné ji použít všude tam, kde je řešení možné nalézt pomocí mnohokrát opakovaných náhodných pokusů.

Jednou z prvních aplikací uvedené metody ve fyzice, bylo modelování chování feromagnetických materiálů. Magnetismus je reprezentován spiny, které mohou mít dva možné stavy. Ernst Ising proto navrhl model feromagnetu ve formě mřížky, přičemž v každém bodě mřížky i je umístěn spin s_i , který může nabývat hodnoty $+1$ nebo -1 [136].

Spiny feromagneticky vzájemně interagují, což znamená, že sousedé preferují mít stejnou hodnotu spinu. Výsledná energie takto popsané soustavy je dána Hamiltonovou funkcí (31)

$$H_{Ising} = \sum_{(ij)} (1 - \delta_{s_i s_j}) \quad (31)$$

kde suma je přes všechny sousedy a δ_{ab} je Kroneckerovo delta [136]. Energie soustavy je nulová, pokud všechny spiny mají stejnou hodnotu, a kladná v každém jiném případě.

Australský matematik Renfrey Burnard Potts zobecnil v roce 1952 ve své disertační práci Isingův model feromagnetu tak, aby mohl každý spin nabývat ne pouze dvou, ale q různých stavů [28]. V návaznosti na tyto práce představili vědci A. P. Anderson a D.J Srolovitz z Corporate Research Science Laboratory, v roce 1984 poprvé možnost využití metody Monte Carlo s Pottsovým zobecněným modelem pro simulace kinetiky růstu zrn a pro zkoumání zrnitosti a topologie ve dvourozměrném prostoru [29]. V roce 1989 byl uvedený algoritmus rozšířen i na trojrozměrný prostor. V současné době je velká část výzkumných prací zaměřena především do oblasti simulací a teorie běžného růstu zrn v trojrozměrném prostoru především pro jednofázové oceli [32,33]. Další typ publikací se týká simulací abnormálního růstu zrna, orientace a anizotropie růstu zrn, ale také simulací růstu zrn u dvoufázových ocelí [34,35,36].

7.1.1. Příprava simulace s využitím metody MCP

Při přípravě simulace věnované mikrostruktuře je třeba se rozhodnout, jaký typ mřížky modelu bude použit a jaké okrajové podmínky budou uvažovány. Při 2D simulacích je velmi často používána čtvercová mřížka (s osmi nejbližšími sousedy), nebo trojúhelníková mřížka (s šesti nejbližšími sousedy). Přestože je použití čtvercové mřížky nejjednodušší, v průběhu let došlo k mnoha diskusím o vlivu typu základní mřížky na přesnost výsledků simulací.

Holm a kolektiv ukázali, že mřížkové efekty jsou závislé na simulačním algoritmu. Při růstu definovaného počtu sousedních mřížkových bodů dochází ke snížení energetické anizotropie mřížky. Proto by do výpočtu neměly být zařazeny pouze nejbližší sousední mřížkové body modelu, ale také druhý nejbližší bod ve čtvercové 2D mřížce a druhý a třetí nejbližší bod v krychlové 3D mřížce [137]. Proto se při 3D simulacích a použití krychlové mřížky uvažuje s 26 nejbližšími sousedními body, včetně prvních, druhých a třetích nejbližších sousedů.

Každý mřížkový bod představuje při numerické simulaci tzv. MCU jednotku (Monte Carlo Unit), která má přiřazenu krystalografickou orientaci určenou úhly rotace v trojrozměrném Eulerově prostoru. Kromě toho musí být opatřena okrajovou podmínkou, která může být definována jako pevná, volná, nebo opakující se. Nejběžnější z nich je opakující se okrajová podmínka, která v trojrozměrném prostoru definuje připojení levé mřížkové plochy na mřížkovou plochu nejvíce vpravo, připojení přední mřížkové plochy na nejzadnější plochu a

připojení nejspodnější mřížkové plochy na plochu nejvyšší. Tato okrajová podmínka může být jednoduše chápána jako pokračování periodicity mřížky, přičemž hranice nemá vliv na růst jednotlivých zrn. Zrna na hranici mřížky jsou rozdělena, ale z důvodu periodicity pokračování mřížky jsou všechna tato zrna posuzována jako celek. Naopak volná okrajová podmínka znamená, že MCU jsou na hranici mřížky v interakci se všemi sousedními MCU na stejné hranici, a se všemi sousedními MCU v mřížce, ale ne s MCU na opačné hranici. Pevná okrajová podmínka pak definuje, že všechny MCU na hranici mřížky nemají šanci v průběhu simulace měnit své vlastnosti.

Základní algoritmus Monte Carlo Potts modelu, řeší na základě definovaného časového kroku počet N možných pokusů o přeorientování mřížkového bodu (MCU), kde N je rovno celkovému počtu MCU mřížky. To znamená, že v případě prostorové 3D simulace bude na mřížce o rozměrech $200 \times 200 \times 200$ MCU celkový počet možných přeorientací roven $N = 8\,000\,000$. Matematický popis metody a posloupnost kroků při simulacích pomocí metody Monte Carlo Potts je popsána například v pracích [137,138].

7.2. Způsob výpočtu velikosti zrna v komerčně využívaných programech

V současnosti preferované komerční simulační programy využívají k simulacím růstu austenitického zrna v TOO výhradně metodu Monte Carlo s Pottsovým zobecněním. Při výpočtu vycházejí z rovnice (29), přičemž základními proměnnými definovanými uživatelem před vlastním výpočtem jsou počáteční velikost zrna příslušného materiálu D_0 a hodnota variabilního exponentu m , definujícího způsob růstu zrna. Exponent m může nabývat hodnot od 2 do 5. Okrajové podmínky uvedené v kapitole 7.1.1. jsou již součástí využívaného matematického modelu a jsou pro danou oblast aplikovány v závislosti na hodnotě počáteční velikosti zrna D_0 . Hodnoty aktivační energie Q a celkové konstanty pro výpočet velikosti zrna K_0 , jsou přiřazeny příslušnému materiálu z materiálové databáze.

Protože je získávání vstupních dat pro numerické simulace růstu zrn finančně náročné, většina materiálů v databázi neobsahuje hodnoty aktivační energie Q , ani konstanty K_0 . V takových případech je v uživatelských manuálech programů pro daný materiál doporučeno použít při simulacích růstu zrna hodnoty konstanty $K_0 = 0,4948 \cdot 10^{14} \text{ [mm}^4 \cdot \text{s}^{-1}]$ a poměr aktivační energie a plynové konstanty Q/R v rozmezí hodnot 65000 až 78000 [K], při současném definování hodnoty exponentu $m = 4$ [114,156].

Výpočty realizované uvedeným způsobem však vykazují odchylky od experimentálně změřených hodnot, zejména při delších expozičních časech na dané teplotě. Proto bude v následujících kapitolách ukázán postup, jakým je možné pro konkrétní materiál získat hodnotu konstanty K_0 a hodnotu aktivační energie Q . Díky znalosti těchto dvou veličin je možné, ve shodě s rovnicí (30), generovat křivku kinetiky růstu zrna pro daný materiál, využitelnou při vlastních numerických simulacích.

V komerčních simulačních programech je pro výpočet využívána rovnice (32) vyjadřující rychlost růstu zrna. Tato rovnice je odvozena z rovnic (29) a (30).

$$\dot{D}^m = K_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \quad (32)$$

Význam symbolů v rovnici (32) je ve shodě s popisem u rovnic (29) a (30). Uvedený výpočtový vztah je určen pro případy, kdy je množství austenitu konstantní nebo se snižuje. Pokud se jedná o případ, kdy množství austenitu roste, do rovnice (32) je zahrnut také vliv zvyšujícího se podílu austenitu a rychlosti transformace této fáze. V takovém případě je výpočet velikosti zrna realizován v souladu s rovnicí (33).

$$\dot{D}^m = K_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) - \frac{\dot{\lambda}}{\lambda} D^m \quad \text{pro } \dot{\lambda} > 0 \text{ tvoří se austenit} \quad (33)$$

Hodnotou λ je v rovnici (33) vyjádřen podíl austenitu a hodnotou $\dot{\lambda}$ rychlost transformace této fáze. V případech, kdy se již austenit netvoří, tedy pokud je $\dot{\lambda} \leq 0$, platí vztah (32).

Při vlastním výpočtu velikosti zrna se vychází ze spočítaných teplotních polí v simulovaném místě vzorku. To znamená, že přednostně rostou zrna v místech nejvyšších teplot a teplotních gradientů. Naopak při simulacích se stacionárním teplotním polem a nulovým teplotním gradientem budou růst zrna rovnoměrně v celém objemu materiálu.

7.3. Vstupní data pro simulace růstu zrna a stanovení kinetiky jejich růstu

Jak již bylo uvedeno v předchozích kapitolách, růst zrna je závislý na teplotě expozice, délce výdrže na této teplotě, ale je ovlivněn také dalšími ději, jako je například sekundární precipitace. Experimentálně bylo zjištěno, že k částečnému růstu zrn dochází již po dosažení transformační teploty. Zřetelný růst je však zřejmý až při teplotách převyšujících 900°C.

Velikost austenitického zrna je přímo závislá na teplotě expozice a době výdrže na dané teplotě, přičemž s rostoucí teplotou se zároveň zvyšuje rychlost růstu zrna. Přitom ale existuje řada faktorů omezujících růst zrna a zpomalujících kinetiku jeho růstu. Nejčastěji se jedná o zpomalení růstu z důvodu přítomnosti dalších částic bránících pohybu hranic zrn. Jedná se především o velmi malé oxidy, sulfidy, nitridy, karbidy nebo silikátové částice [142]. Tyto částice již mohou být v materiálu přítomny, nebo se vylučují podél hranic zrn při expoziční teplotě. Díky nim vznikají na hranicích tzv. zadržovací (Zenerovy) síly, působící proti směru růstu zrna [33]. Díky tomu lze stanovit mezní rozměr zrna pro nějž platí, že hnací síla růstu zrna je zde v rovnováze se Zenerovými silami. Tento rozměr je definován Zenerovou rovnicí (34) [142].

$$R_{krit} = A \cdot r \cdot f^{-1} \quad (34)$$

Veličina R_{krit} definuje mezní rozměr zrna vyjádřený kritickým poloměrem zrna, A je konstanta pro daný typ materiálu, r je střední poloměr částic bránících pohybu hranic zrn, a f je objemový podíl těchto částic. Vliv Zenerových sil na fixaci hranic zrn lze pozorovat především při nižších teplotách, kdy jsou přítomny všechny částice bránící pohybu hranic zrn. Při vyšších teplotách dochází k postupnému rozpouštění těchto částic a Zenerovy síly se snižují. [143]

Při experimentálním stanovení vlivu teploty a délky výdrže na velikost zrna je nutné brát v úvahu také rychlost ohřevu. Bylo prokázáno, že nižší rychlosti ohřevu, mají za následek větší počáteční velikost zrna [33]. To znamená, že k růstu zrna dochází již během ohřevu na teplotu výdrže. Proto je vhodné při získávání vstupních dat používat poměrně vysoké rychlosti ohřevu v řádu jednotek, případně desítek $^{\circ}\text{C}\cdot\text{s}^{-1}$. K tomu je však nutné mít k dispozici přístroje umožňující velmi vysoké rychlosti ohřevu vzorků. Tyto přístroje pracují nejčastěji na principu indukčního ohřevu, nebo na principu ohřevu elektrickým odporem. Problematické je u těchto přístrojů omezení jejich teplotní využitelnosti, která je zpravidla limitována hodnotou 1200°C .

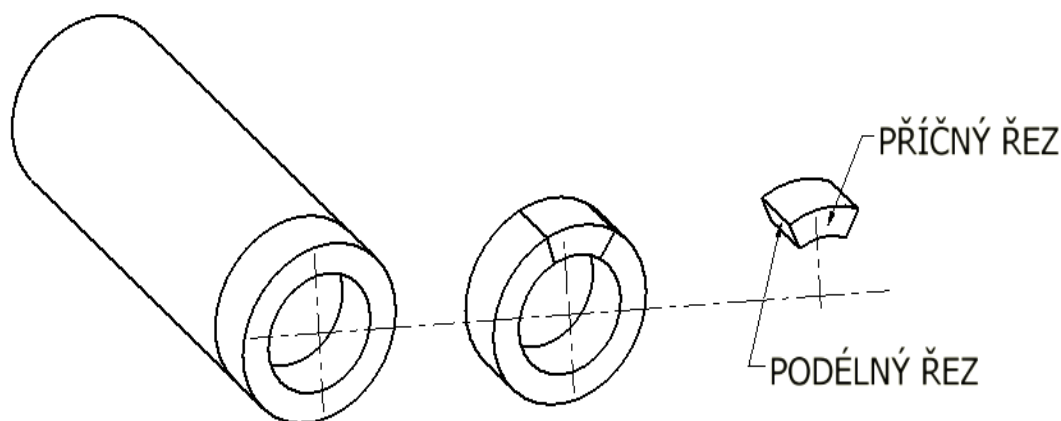
7.3.1. Plán experimentů, vzorky pro stanovení velikosti austenitického zrna

První experimenty s měřením vstupních dat pro potřeby numerických simulací v programu Sysweld byly realizovány v rámci grantového projektu TA02010992 v roce 2012. Měření byla provedena pro austenitické oceli HR3C, S304H a TP347HFG, martenzitickou ocel P92 a bainitickou ocel P24. Všechny uvedené materiály byly k dispozici ve formě trubek. U austenitických ocelí a oceli P92 se jednalo o válcovanou trubku průměru 38 mm a tloušťky 6,3 mm, u bainitické oceli P24 byla použita trubka průměru 42,8 mm a tloušťky 7 mm. Protože se jedná o vzorky odebrané z výrobku intenzivně tvářeného v jednom směru, musí být (v souladu s normou ČSN EN ISO 643) vzorky určené pro stanovení velikosti zrna při vyhodnocení orientovány rovnoběžně s hlavní osou deformace. Důvodem je možné zkreslení výsledků v rovině kolmé na osu tváření z důvodu případné deformace zrn ve směru tváření. Pro potřeby numerických simulací je však dobré znát velikost zrn v příčném i v podélném směru, proto byla velikost zrna hodnocena v obou směrech.

Pro experimentální měření byla v roce 2012 k dispozici pouze programovatelná pec bez ochranné atmosféry, s nepřímým ohřevem elektrickým odporem. Tato pec umožňovala maximální rychlost ohřevu vzorku $15^{\circ}\text{C}\cdot\text{min}^{-1}$, což bylo ověřeno termočlánkem upevněným přímo na zkušebním vzorku a dosažení maximální teploty 1184°C . Pro vlastní měření byly použity prstence tloušťky 12 mm odříznuté z dodaných trubek. Jednotlivé vzorky byly rychlostí $15^{\circ}\text{C}\cdot\text{min}^{-1}$ postupně ohřáty na teploty 1000, 1100 resp. 1180°C . Poté následovala výdrž na příslušné teplotě po dobu 4 a 8 hodin. Po příslušné výdrži na teplotě byl vzorek z pece vyjmut a rychle schlazen ve vodě. Důvodem prudkého ochlazení je u ocelí

s polytropickou přeměnou snaha o úplnou bezdifúzní přeměnu austenitu na martenzit. Při vzniku jiných fází by již došlo k ovlivnění výsledků měření. U austenitických ocelí nedochází k fázovým transformacím a intenzivní ochlazení pouze znemožní další růst zrn.

Jednotlivé tepelně exponované vzorky byly následně rozřezány a metalograficky vyhodnoceny v příčném i podélném směru v souladu s obrázkem 18. Získané údaje o velikosti austenitického zrna v příčném i podélném řezu jsou pro austenitické oceli HR3C, S304H a TP347HFG uvedeny v přílohách 3.2., 3.3. a 3.4., pro ocel P92 v příloze 3.5. a pro ocel P24 v příloze 3.6. Díky vysokým teplotám, dlouhým časům výdrže a přítomnosti oxidační atmosféry došlo u ocelí P92 a P24 k velmi intenzivní vysokoteplotní oxidaci povrchu. U austenitů S304H a TP347HFG došlo po 8 hodinách výdrže při teplotě 1100°C pouze k nepatrnému okujení povrchu a materiál HR3C vykazoval při stejných podmínkách teplotní expozice zcela čistý povrch.



Obr. 18. Schématické znázornění míst hodnocení velikosti austenitického zrna

Na začátku roku 2013 se na TUL podařilo získat teplotně-napěťový simulátor Gleeble 3500. Tento přístroj umožňuje dosáhnout u zkušebních těles vysokých rychlostí ohřevu a ochlazování. U vzorků průměru 6 mm lze dosáhnout rychlostí ohřevu až $10\,000^{\circ}\text{C}\cdot\text{s}^{-1}$ a při aplikaci ISO-Q režimu rychlostí ochlazování na povrchu vzorku až $2\,500^{\circ}\text{C}\cdot\text{s}^{-1}$. Při standardním režimu ochlazování jde pak o rychlosti ochlazování okolo $100^{\circ}\text{C}\cdot\text{s}^{-1}$. Navíc mohou být všechny testy v tomto přístroji prováděny ve vakuu, případně v inertní či aktivní ochranné atmosféře plynu, což zcela zabrání případné oxidaci povrchu vzorku. Z těchto důvodů bylo rozhodnuto o zopakování původních experimentů a rozšíření nových experimentů na teploty 900, 1000, 1100 a 1200°C a výdrže na teplotě 30, 120, 240 a 480 minut. Plán experimentů vlivu teploty expozice a délky výdrže na velikost austenitického zrna u oceli S304H realizovaný na přístroji Gleeble 3500 je ukázán v tabulce 27. Tyto experimenty byly ve stejném rozsahu realizovány i pro ostatní zmíněné materiály. Maximální teplota experimentů byla volena 1200°C, aby bylo možné aplikovat metodické postupy vedoucí

k získání vstupních údajů simulací růstu zrna pro většinu v současnosti používaných zařízení sloužících k ohřevu materiálu. Nicméně z důvodu posouzení vlivu vysokých teplot na hodnoty aktivační energie Q a konstanty K_0 , byly experimenty pro materiál S304H rozšířeny také na teplotu 1350°C. V kapitole 7.3.5. bude podrobně popsán vliv vzorků exponovaných při teplotě 1350°C na výslednou velikost veličin Q a K_0 .

Pro teplotní expozice na daných teplotách v přístroji Gleeble, byly použity válcové zkušební vzorky průměru 6 mm, vyrobené z již dříve zmíněných trubek. Každý z exponovaných vzorků byl následně metalograficky zpracován, přičemž velikost zrna byla hodnocena v podélném i příčném směru, v souladu s normou ČSN EN ISO 643.

Tab. 27. Plán experimentálních měření na přístroji Gleeble 3500 pro materiál S304H

| S304H | | Doba výdrže na příslušné teplotě | | | |
|------------------|-----------|----------------------------------|---------|---------|---------|
| | | 0,5 [hod] | 2 [hod] | 4 [hod] | 8 [hod] |
| Teplota expozice | 900 [°C] | x | x | x | x |
| | 1000 [°C] | x | x | x | x |
| | 1100 [°C] | x | x | x | x |
| | 1200 [°C] | x | x | x | x |

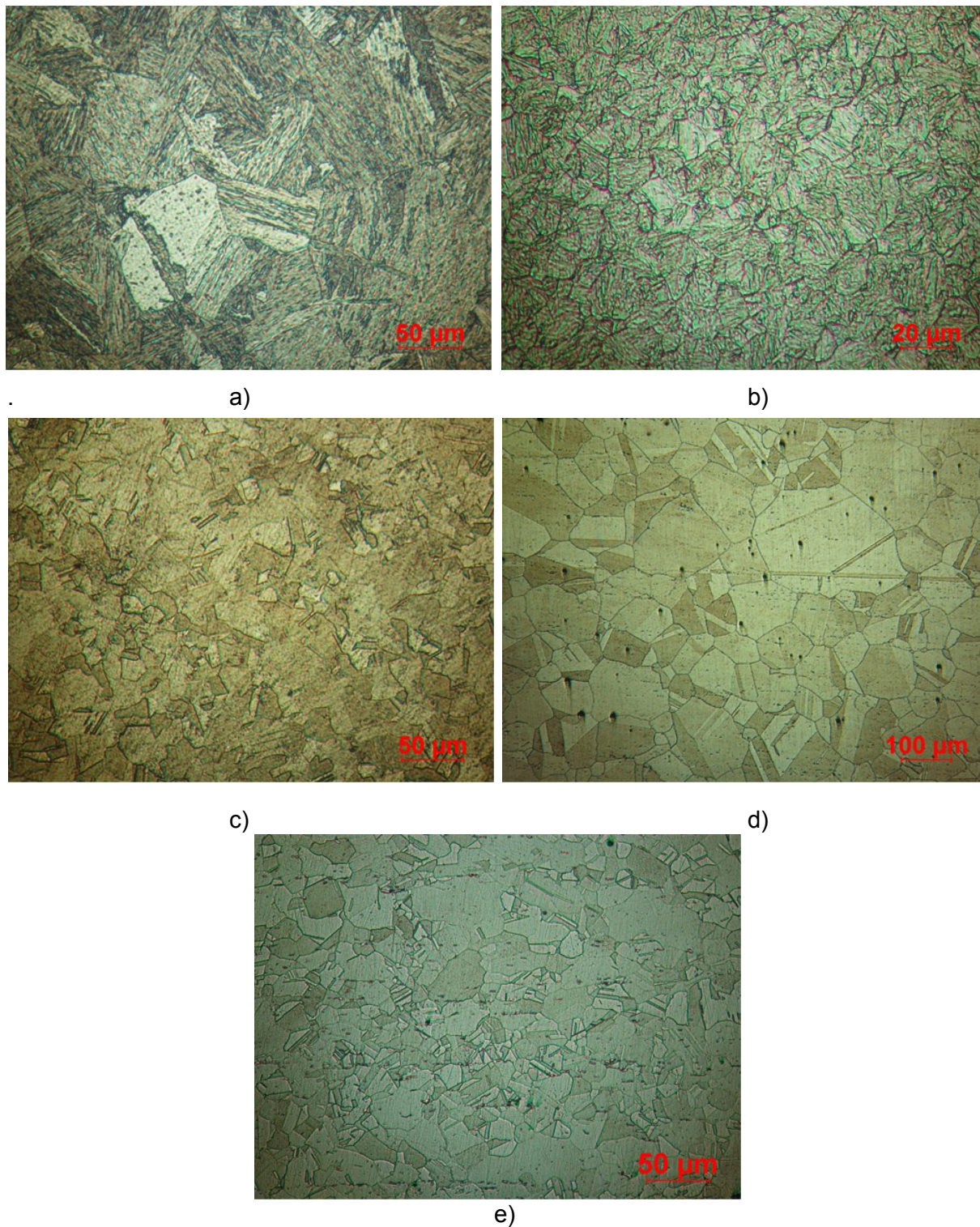
7.3.2. Příprava vzorků pro vyhodnocení velikosti austenitického zrna

Tepelně exponovaná tělesa byla pomocí metalografické pily následně rozřezána tak, že z každého tělesa byly získány dva vzorky k vyhodnocení. Jeden v příčném směru a druhý v podélném směru. Všechny vzorky byly připraveny běžnými metalografickými postupy a naleptány tak, aby se co nejvíce zvýraznily hranice zrn. Pro oceli P24 a P92 bylo ke zvýraznění hranic zrn použito leptadlo Villela Bain, případně je ještě možné použít leptadlo Vogel. U austenitických ocelí HR3C, S304H a TP347HFG musel být použit ke zviditelnění hranic zrn poměrně agresivní roztok tvořený 80 ml HCl; 13 ml HF a 7 ml HNO₃, protože leptadla Villela Bain ani Vogel na tyto materiály nepůsobila. Ještě je doporučeno u jednofázových vysokolegovaných austenitických ocelí použít pro leptání směs Glyceregia, Kallingovo činidlo (č. 2), nebo Marblovo činidlo.

U jednofázových nebo dvoufázových (duplexních) vysokolegovaných ocelí se osvědčuje elektrolytické leptání stejnosměrným proudem. Existují dva základní postupy:

- 1) První způsob zahrnuje elektrolytické leptání stejnosměrným proudem při napětí 1,4 V ve vodním roztoku 60% kyseliny dusičné po dobu 60 až 120 s (mělo by dojít ke zviditelnění hranic zrn, ale ne ke zviditelnění hranic dvojčat).
- 2) Druhý způsob zahrnuje elektrolytické leptání stejnosměrným proudem při napětí 6 V po dobu 60 sekund ve vodním roztoku 10% kyseliny šťavelové. Tento způsob leptání není tak agresivní jako u bodu 1), je však méně účinný.

Na obrázku 19 jsou ukázány naleptané struktury jednotlivých materiálů po teplotní expozici 4 hodiny při teplotě 1100°C. Na obrázku 19 a) jsou zvýrazněná zrna oceli P24, obrázek 19 b) patří oceli P92, obrázek 19 c) patří oceli S304H, obrázek 19 d) patří oceli HR3C a na obrázku 19 e) jsou zvýrazněná zrna na tepelně exponovaném vzorku z oceli TP347HFG.

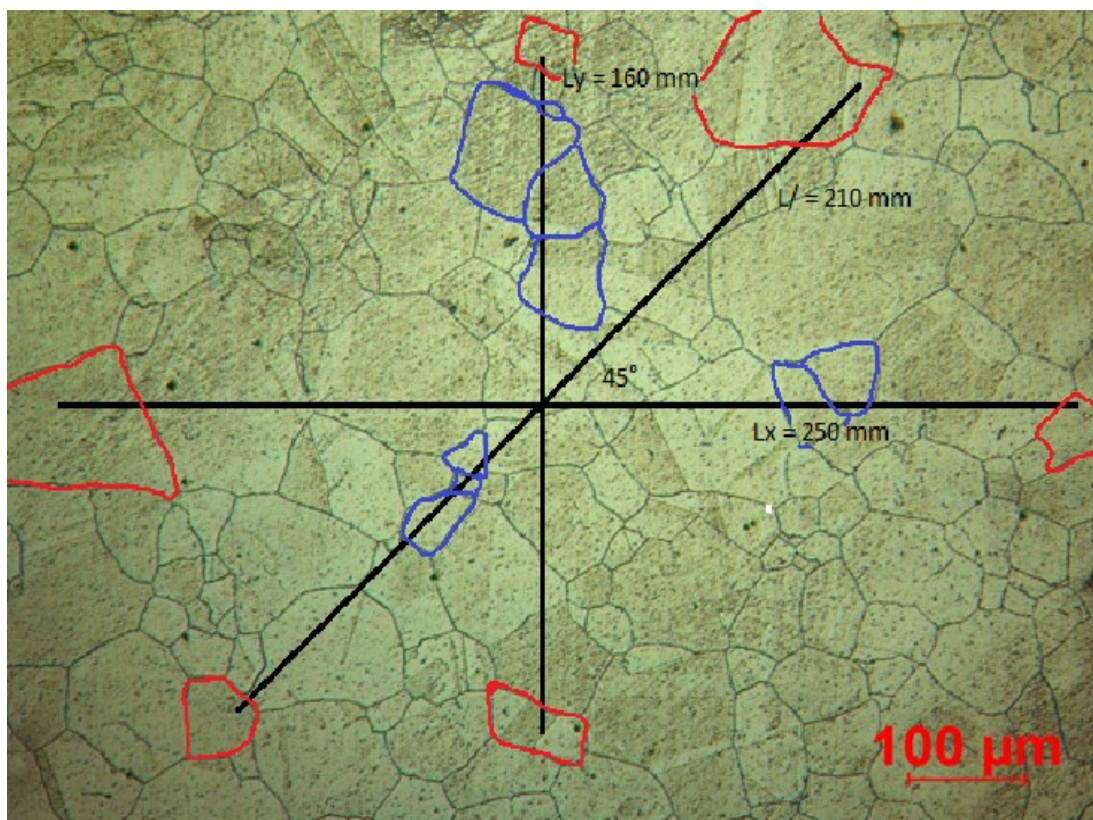


Obr. 19. Obrázky mikrostruktury po teplotní expozici 4 hodiny při teplotě 1100°C se zvýrazněnými hranicemi zrn pro oceli a) P24; b) P92; c) S304H; d) HR3C; e) TP347HFG

7.3.3. Možné způsoby vyhodnocení velikosti austenitického zrna

Metalograficky zpracované a naleptané vzorky lze při stanovení velikosti zrna vyhodnotit několika možnými metodami a způsoby. Buď je k určení velikosti zrna použit přímo naleptaný vzorek a metoda komparačního porovnání, nebo je velikost zrn hodnocena nepřímou metodou, kdy jsou na digitálním mikroskopu nasnímaná různá místa vzorku a k dalšímu vyhodnocení jsou již použity pouze nasnímané struktury. Takto získané snímky se nejčastěji vyhodnocují pomocí lineární průsečíkové metody, nebo pomocí Jefferiho planimetrické metody. Vyhodnocení lze ale provést také s využitím speciálního software určeného pro optickou i elektronovou mikroskopii.

Nejrychlejší, ale také nejméně přesnou metodou stanovení velikosti zrna je tzv. komparační metoda. Pomocí této metody je na komparačním mikroskopu při 100x zvětšení porovnáván reálně vytvořený a metalograficky připravený vzorek s normovanými zobrazeními velikostí zrna. Uvedeným porovnáním je však určeno pouze číslo velikosti zrna G ve vzorku, tak jak je zřejmé z tabulky 28, ale ne přesná velikost zrna. Nevýhodou je u této metody také značný vliv subjektivity hodnocení, zejména pokud se reálný vzorek nachází na rozhraní dvou skupin velikosti zrna. Uvedený způsob hodnocení je navíc vhodný pouze pro rozmezí velikosti zrna odpovídajícím rozmezí skupin $G-1(00)$ až $G10$ v souladu s normou ČSN EN ISO 643.



Obr. 20. Způsob vyhodnocení velikosti zrna pomocí lineární průsečíkové metody

Z nepřímých metod stanovení velikosti zrna je nejčastěji používána lineární průsečíková metoda. Důvodem je zejména její jednoduchost. U lineární průsečíkové metody se velikost

zrn určuje pomocí přesně definovaných úseček zanesených do digitálně nasnímaných fotografií struktury (obr. 20). Hodnotí se počet zrn, která tato úsečka protne. Z důvodu možné deformace zrn v jednom směru je vhodné použít k vyhodnocení více úseček (zpravidla 3), z nichž každá je orientována v jiném směru, tak jak je ukázáno na obrázku 20. Délku úseček je možné zvolit libovolně. Pravidlem je pouze snaha o protnutí co největšího počtu zrn úsečkou, z důvodu eliminace nepřesností měření.

Na modelovém příkladu (obr. 20) bude ukázáno stanovení velikosti zrna pomocí lineární průsečíkové metody. Příklad vyhodnocení byl vybrán pro vzorek z materiálu HR3C exponovaný při teplotě 1000°C po dobu 8 hodin. Tento vzorek byl nasnímán pomocí digitální kamery Nikon Digital Sightn připevněné k optickému mikroskopu Neophot 21 při stonásobném zvětšení. Na snímek byly z důvodu vyhodnocení zakresleny 3 úsečky, přičemž délka horizontální úsečky umístěné na snímek byla $l_x = 250\text{mm}$, délka vertikální úsečky byla $l_y = 160\text{mm}$ a délka úsečky vytvořené pod úhlem 45° byla $l_c = 210\text{mm}$. K přepočtu délek jednotlivých úseček l_x , l_y a l_c na hodnoty odpovídající skutečným délkám úseček na reálném vzorku je nezbytné ještě definovat parametr B odpovídající změřené délce měřítka na snímku v milimetrech a parametr A odpovídající skutečné délce měřítka na reálném vzorku. Pro modelový příklad na obrázku 20, byla zjištěna velikost měřítka na snímku $B = 28\text{ mm}$, čemuž odpovídá skutečná délka na reálném vzorku $A = 100\text{ }\mu\text{m}$ (0,1 mm). Pak lze pro výpočet skutečných délek jednotlivých úseček L_x , L_y a L_c použít rovnice (35), (36) a (37).

$$L_x = \frac{A[\text{mm}] \cdot l_x[\text{mm}]}{B[\text{mm}]} \quad (35)$$

$$L_y = \frac{A[\text{mm}] \cdot l_y[\text{mm}]}{B[\text{mm}]} \quad (36)$$

$$L_c = \frac{A[\text{mm}] \cdot l_c[\text{mm}]}{B[\text{mm}]} \quad (37)$$

Skutečná délka horizontální úsečky na vzorku byla $L_x = 0,893\text{ mm}$, skutečná délka vertikální úsečky na vzorku byla $L_y = 0,571\text{ mm}$ a skutečná délka úsečky pod úhlem 45° měřila $L_c = 0,750\text{ mm}$. Poté se ve shodě s obrázkem 20 stanoví pro každou z úseček počet protnutých zrn. Přitom platí následující podmínky:

- Prochází-li úsečka celým zrnem (modře ohraničená zrna na obr. 20) počítá se každé takové zrno jako 1 celek – hodnota n_1 .
- Prochází-li úsečka pouze po hranici zrna, počítá se každé takové zrno jako polovina celku – hodnota n_2 .

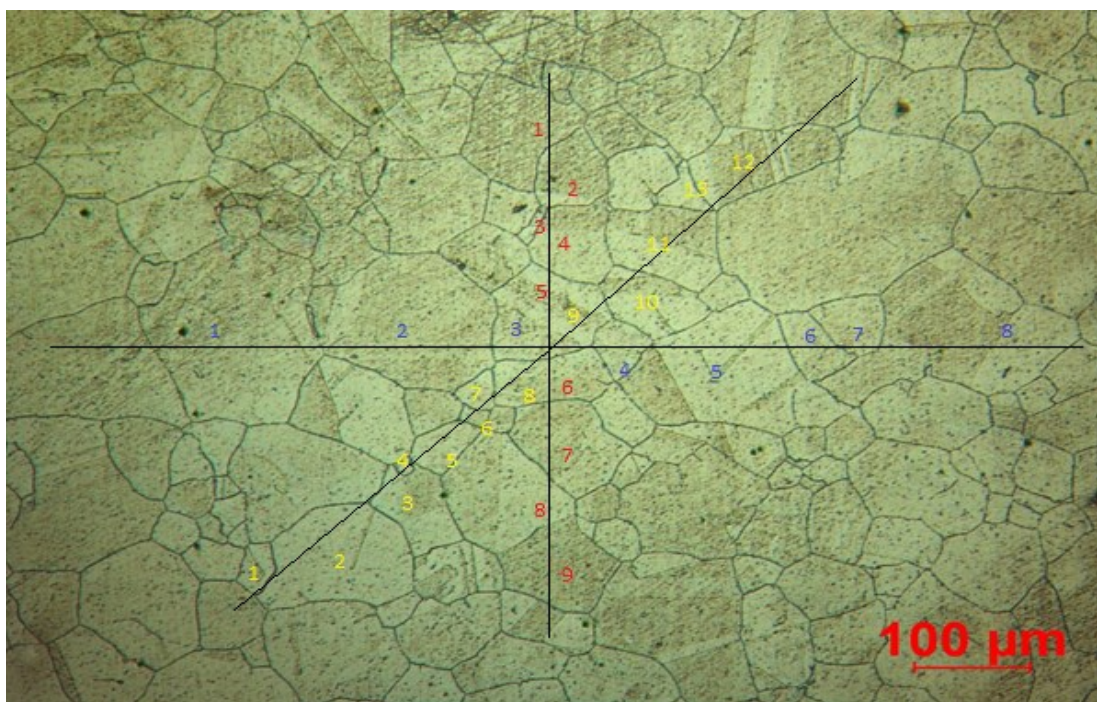
- c) Každé počáteční a koncové zrn, do něhož zasáhl okraj úsečky (červeně ohraničená zrna na obr. 20), se počítá jako polovina celku. Veličina n_3 tak může nabývat hodnot 0; 0,5; nebo 1.

Celkový adekvátní počet zrn protnutý úsečkou je dán součtem vyjádřeným v rovnici (38).

$$n = n_1 + \frac{n_2}{2} + \frac{n_3}{2} \quad (38)$$

V souladu s obrázkem 21 je celkový počet zrn protnutých úsečkou L_x roven $n_x = 9$ zrn, počet zrn protnutých úsečkou L_y roven $n_y = 10$ zrn a počet zrn protnutých úsečkou L_c roven $n_c = 13$ zrn. Dále je třeba definovat průměrný počet úseků (zrn) N vztažený na 1mm měřené úsečky podle vztahu (39), kde n je celkový počet zrn protnutých úsečkou a L je skutečná délka příslušné úsečky.

$$N = \frac{n}{L} \quad [mm^{-1}] \quad (39)$$



Obr. 21. Naznačení počtu zrn pro jednotlivé úsečky

Počet zrn vztažený na 1 mm úsečky je pro horizontální úsečku L_x roven $N_x = 10,078 \text{ mm}^{-1}$; pro vertikální úsečkou L_y roven $N_y = 17,513 \text{ mm}^{-1}$ a pro úsečkou L_z vedenou pod 45° je počet zrn vztažený na 1 mm úsečky roven $N_z = 17,333 \text{ mm}^{-1}$. Průměrný počet úseků (zrn) na milimetr délky úsečky je dán rovnicí (40). Pro vzorek z materiálu HR3C exponovaný při teplotě 1000°C po dobu 8 hodin je průměrný počet zrn na jeden mm úsečky $\bar{N}_L = 14,517$.

$$\bar{N}_L = \sqrt[3]{N_x \cdot N_y \cdot N_z} \quad (40)$$

Na základě takto stanoveného průměrného počtu zachycených úseků zrn připadajících na jeden milimetr délky úsečky je možné v souladu s normou ČSN EN ISO 643 stanovit střední velikost zrna podle tabulky 28. Po odečtu z tabulky 28 je zřejmé, že vzorek s průměrným počtem zachycených úseků $\bar{N}_L = 14,517 \text{ mm}^{-1}$ je na rozhraní čísel velikosti zrna G4 a G5.

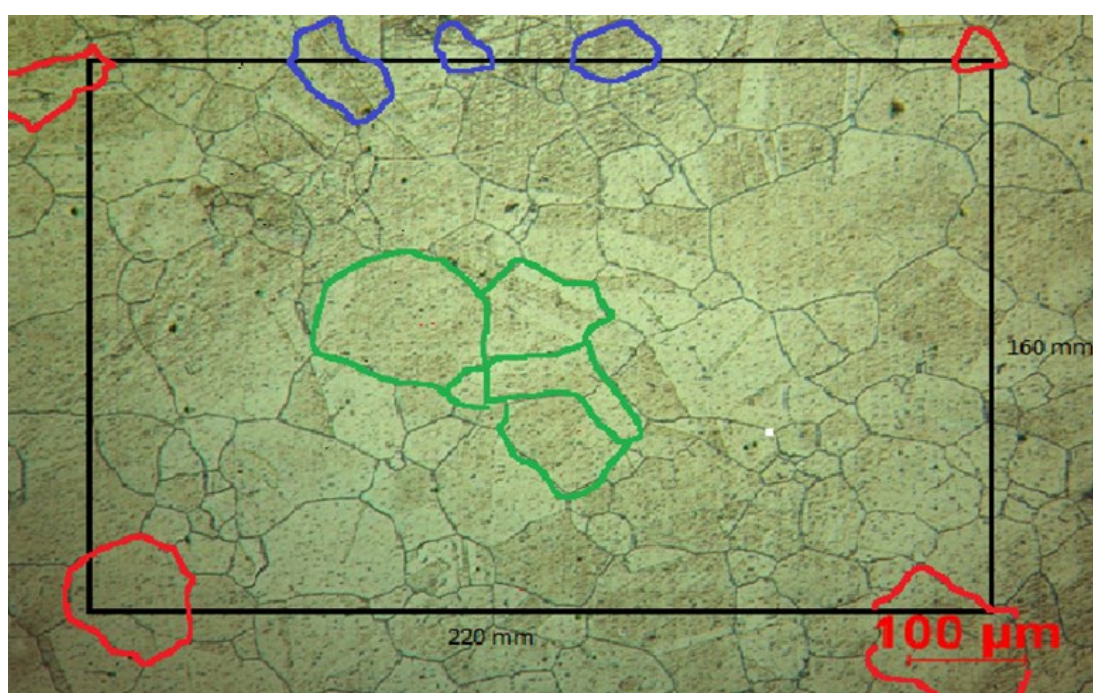
Pomocí váženého průměru tak lze díky tabulce 28 stanovit střední průměr zrna vzorku \bar{d} , který v tomto případě činí $\bar{d} = 0,0784 \text{ mm}$.

Lineární průsečíková metoda je oproti komparační metodě mnohem přesnější, protože pomocí komparační metody je možné přiřadit střední průměr zrna pouze na základě porovnávacího odhadu čísla velikosti zrna G.

Tab. 28. Hodnocení počtu zrn ve vztahu k různým parametrům

| Číslo velikosti zrna | Počet zrn na milimetr čtvereční | | | Střední průměr zrna | Střední plocha zrna | Průměrná délka zachyceného úseku | Průměrný počet úseků na milimetr měřicí čáry |
|---|---------------------------------|---------------|-----------------|------------------------------|---------------------|----------------------------------|--|
| | M | | | | | | |
| | Jmenovitá hodnota | Mezní hodnoty | | | | | |
| od | | do | \bar{d} mm | \bar{a} mm ² | l mm | $\overline{N_L}$ | |
| -7 | 0,0625 | 0,046 | 0,092 | 4,000 | 16,0 | 3,577 | 0,279 |
| -6 | 0,125 | 0,092 | 0,185 | 2,828 | 8,0 | 2,529 | 0,395 |
| -5 | 0,25 | 0,185 | 0,37 | 2,000 | 4,0 | 1,788 | 0,559 |
| -4 | 0,50 | 0,37 | 0,75 | 1,414 | 2,0 | 1,265 | 0,790 |
| -3 | 1 | 0,75 | 1,5 | 1,000 | 1,0 | 0,894 | 1,118 |
| -2 | 2 | 1,5 | 3 | 0,707 | 0,5 | 0,632 | 1,582 |
| -1(00) | 4 | 3 | 6 | 0,500 | 0,25 | 0,447 | 2,237 |
| 0 | 8 | 6 | 12 | 0,354 | 0,125 | 0,320 | 3,125 |
| 1 | 16 | 12 | 24 | 0,250 | 0,0625 | 0,226 | 4,42 |
| 2 | 32 | 24 | 48 | 0,177 | 0,0312 | 0,160 | 6,25 |
| 3 | 64 | 48 | 96 | 0,125 | 0,0156 | 0,113 | 8,84 |
| 4 | 128 | 96 | 192 | 0,0884 | 0,00781 | 0,080 | 12,5 |
| 5 | 256 | 192 | 384 | 0,0625 | 0,00390 | 0,0566 | 17,7 |
| 6 | 512 | 384 | 768 | 0,0442 | 0,00195 | 0,0400 | 25,0 |
| 7 | 1 024 | 768 | 1 536 | 0,0312 | 0,00098 | 0,0283 | 35,4 |
| 8 | 2 048 | 1 536 | 3 072 | 0,0221 | 0,00049 | 0,0200 | 50,0 |
| 9 | 4 096 | 3 072 | 6 144 | 0,0156 | 0,000244 | 0,0141 | 70,7 |
| 10 | 8 192 | 6 144 | 12 288 | 0,0110 | 0,000122 | 0,0100 | 100 |
| 11 | 16 384 | 12 288 | 24 576 | 0,0078 | 0,000061 | 0,00707 | 141 |
| 12 | 32 768 | 24 576 | 49 152 | 0,0055 | 0,000030 | 0,00500 | 200 |
| 13 | 65 536 | 49 152 | 98 304 | 0,0039 | 0,000015 | 0,00354 | 283 |
| 14 | 131 072 | 98 304 | 196 608 | 0,0028 | 0,0000075 | 0,00250 | 400 |
| 15 | 262 144 | 196 608 | 393 216 | 0,0020 | 0,0000037 | 0,00170 | 588 |
| 16 | 524 288 | 393 216 | 786 432 | 0,0014 | 0,0000019 | 0,00120 | 833 |
| 17 | 1 048 576 | 786 432 | 1 572 864 | 0,0010 | 0,00000095 | 0,00087 | 1 149 |
| Poznámka: Tato tabulka uvádí hodnoty mezi různými parametry rovnoosých zrn. | | | | | | | |

Planimetrická metoda je nejpřesnější metodou stanovení velikosti zrna, protože díky ní lze přesně určit střední plochu zrna \bar{a} a díky tomu i stanovit střední průměr zrna \bar{d} . U této metody se určuje velikost zrn pomocí uzavřeného obrazce a počtu zrn umístěných uvnitř a po okrajích obrazce. Podle normy by měl být minimální počet zrn umístěných v obrazci 50. Použitý tvar obrazce může být libovolný (kruh, čtverec, trojúhelník), přesto bývá přednost dávana obdélníku. Příklad vyhodnocení bude demonstrován na stejném snímku, jako v případě lineární průsečkové metody. Do uvedeného snímku byl z důvodu vyhodnocení vložen obdélník o rozměrech stran $l_x = 220\text{ mm}$ a $l_y = 160\text{ mm}$, tak jak je ukázáno na obrázku 22. Ve shodě s rovnicemi (35) a (36) byly vypočteny skuteč. strany obdélníku $L_x = 0,786\text{ mm}$ a $L_y = 0,571\text{ mm}$ a následně také skutečná plocha zobrazeného obdélníku $S = 0,449\text{ mm}^2$.



Obr. 22. Způsob vyhodnocení velikosti zrna pomocí planimetrické metody

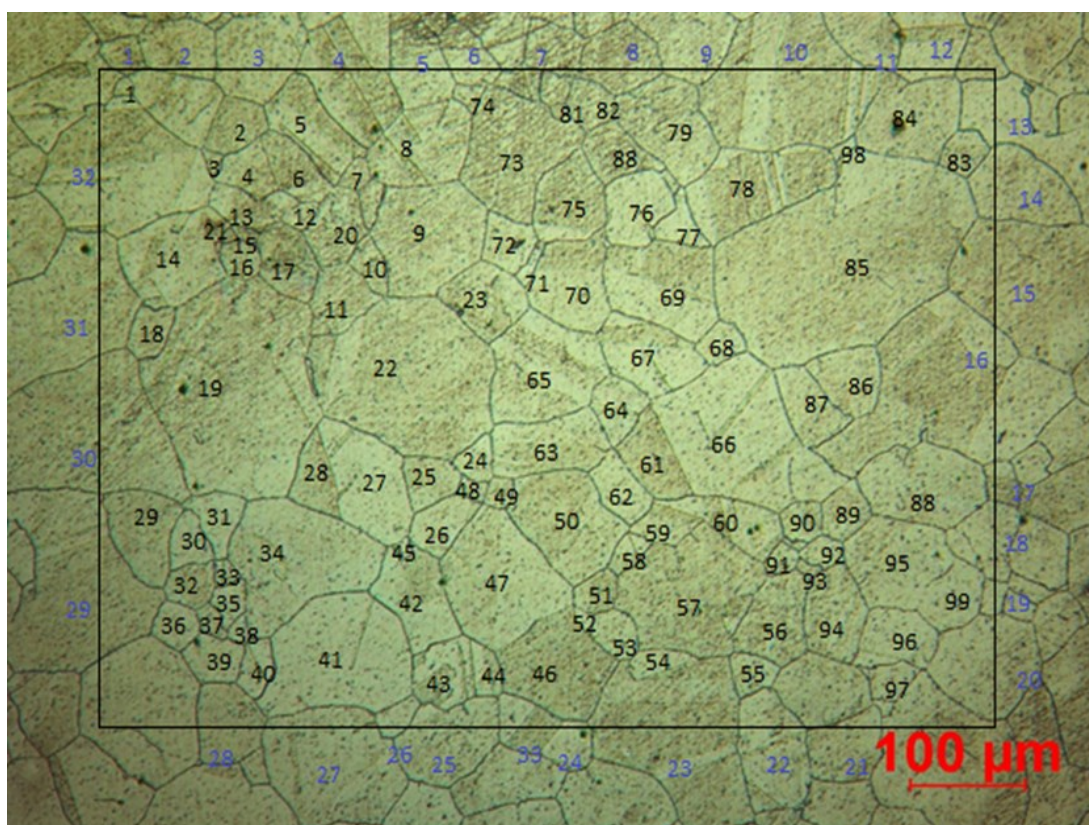
Poté již stačí stanovit příslušný počet zrn odpovídající danému plošnému obrazci n_s . Přitom ale platí pro vyhodnocení planimetrickou metodou následující podmínky:

- Všechna zrna celou svou plochou umístěná uvnitř plošného útvaru (zeleně ohraničená zrna na obr. 22) zcela náleží danému útvaru a každé zrna se počítá jako jeden celek – hodnota n_1 .
- Protínají-li hranice plošného útvaru jednotlivá zrna (modře ohraničená zrna na obr. 22), počítá se každé takové zrna jako polovina celku – hodnota n_2 .
- Zasahuje-li do některého ze zrn roh plošného útvaru (červeně ohraničená zrna na obr. 22), počítá se každé takovéto zrna jako čtvrtina celku – hodnota n_3 .

Celkový adekvátní počet zrn náležejících plošnému útvaru je u planimetrické metody dán součtem vyjádřeným v rovnici (41).

$$n_s = n_1 + \frac{n_2}{2} + \frac{n_3}{4} \quad (41)$$

Na obrázku 23 je názorně ukázán postup při stanovení adekvátního počtu zrn náležejících plošnému útvaru. Černými čísly jsou znázorněna zrna náležející celá do vyznačeného obdélníku $n_1 = 99$ a modrými čísly jsou znázorněna zrna protnutá hranicemi vyznačeného obdélníku $n_2 = 33$. Rohová zrna jsou $n_3 = 4$, tak jak je tomu ve většině případů. Celkový počet zrn náležejících vytvořenému obdélníku $n_s = 116,5$.



Obr. 23. Způsob vyhodnocení adekvátního počtu zrn pomocí planimetrické metody

Jednoduchým podílem adekvátního počtu zrn a skutečné plochy obrazce (obdélníku) je stanovena skutečná střední plocha zrna \bar{a} . Ta je pro uvedený vzorek $\bar{a} = 0,003854 \text{ mm}^2$. Z tohoto údaje jde již snadno matematicky stanovit střední průměr zrna, aniž by k jeho odhadu, nebo přepočtu musela být použita tabulka 28. Ke stanovení středního průměru zrna je u planimetrické metody použita rovnice (42). Střední průměr zrna pro vzorek z materiálu HR3C exponovaný při teplotě 1000°C po dobu 8 hodin vyhodnocený planimetrickou metodou je $\bar{d} = 0,062081 \text{ mm}$. Tento údaj je následně dále zpracován při definování vstupních dat numerických simulací a stanovení křivky kinetiky růstu zrna.

$$\bar{d} = \sqrt{\bar{a}} \quad (42)$$

V této kapitole byly ukázány různé způsoby stanovení středního průměru zrna, jakožto parametru důležitého pro stanovení křivky kinetiky růstu austenitického zrna. Pro všechny způsoby vyhodnocení byl použit stejný vzorek z materiálu HR3C exponovaný při teplotě 1000°C po dobu 8 hodin. Pomocí metody přímého porovnání na komparačním mikroskopu bylo určeno číslo velikosti zrna odpovídající hodnotě G4. Pomocí tabulky 28 proto byl pro tuto metodu stanoven střední průměr zrna $\bar{d} = 0,0884$ mm. Při použití lineární průsečkové metody se hodnota \bar{d} pohybovala v rozmezí 0,0625 až 0,0884 mm (G4 až G5) a pomocí váženého průměru založeného na uvedeném intervalu hodnot bylo určeno $\bar{d} = 0,0784$ mm. Při použití planimetrické metody se vycházelo ze skutečné střední velikosti zrn a tomu odpovídala i hodnota středního průměru zrna $\bar{d} = 0,0621$ mm.

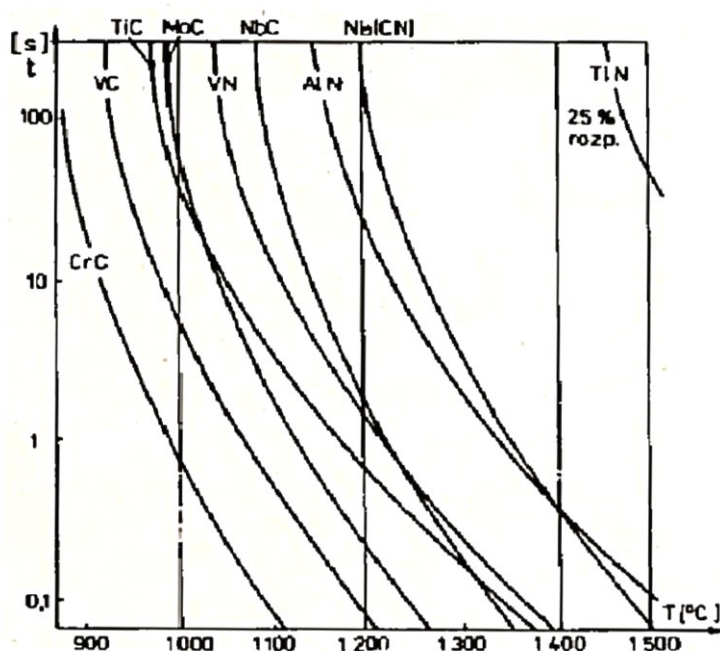
Z uvedených důvodů je pro definování vstupních dat numerických simulací růstu austenitického zrna vyžadováno vyhodnocení pomocí planimetrické metody i přes její pracnost a časovou náročnost.

7.3.4. Způsob stanovení hodnot aktivační energie Q a konstanty úměrnosti K

Jak je zřejmé ze vzorců (29) a (30), k simulacím velikosti zrna je nezbytné znát hodnotu konstanty úměrnosti K a způsob růstu zrna v příslušném materiálu vyjádřený proměnným koeficientem m. Konstantu úměrnosti K je možné stanovit experimentálně pomocí materiálových parametrů Q a K_0 , přičemž parametry Q a K_0 jsou charakteristické pro každý materiál. Naopak stanovit přesnou hodnotu exponentu m je velice problematické, neboť je nutné posoudit, jakým způsobem k růstu zrna dochází. Je sice možné použít vysokoteplotní mikroskopii, při níž je pozorován vzorek ohřátý na expoziční teplotu, ale náklady na takováto měření jsou značné. Z těchto důvodů se při stanovení hodnoty variabilního exponentu m vychází z druhu použitého materiálu a případně ze zkušeností s obdobnými typy materiálů. Například u běžných konstrukčních ocelí je uvažován ideální růst zrna řízený pouze difúzí, a proto se u nich při simulacích používá exponent $m = 2$. U materiálů precipitačně zpevněných mezi něž patří také oceli HR3C, S304H, TP347HFG, P92 a P24 se exponent m pohybuje v rozmezí od 3 do 4,5.

K hodnotě $m = 3$ se bude exponent blížit u materiálů, kde se precipitáty vylučují uvnitř zrn v průběhu jejich růstu. Naopak vyšší hodnoty exponentu m jsou voleny u materiálů, u nichž se precipitáty v zrnech vyskytují již před použitím vlastního teplotního cyklu nebo teplotní expozice vzorku. Přitom platí ve shodě s rovnicí (34), že menší rozměr a větší objemový podíl precipitátů v zrnech vyvolá větší Zenerovy síly, čímž zpomalí růst zrn [33,142]. Proto se zvyšujícím se počtem drobných oxidů, sulfidů, karbidů, nitridů, nebo silikátových částic se

zároveň zvyšuje exponent m a to až k hodnotě $m = 4,5$. Při teplotách překračujících 1000°C se však začínají jednotlivé precipitáty v zrnech rozpouštět, přičemž se zvyšující se teplotou klesá doba potřebná k rozpuštění jednotlivých typů karbidů a nitridů, tak jak je ukázáno na obrázku 24. To má za následek snížení Zenerových sil a je jedním z faktorů zvýšení rychlosti růstu zrn při těchto teplotách u precipitačně zpevněných materiálů. Z uvedených důvodů je vhodné pro simulace dějů probíhajících při teplotách nad 1000°C a překračujících čas 100 sekund, volit exponent $m = 2$. Bylo by také vhodné při aplikaci svařovacích cyklů měnit u precipitačně zpevněných materiálů hodnotu exponentu m v závislosti na dosažené teplotě. Tento postup však prozatím není u komerčně využívaných simulačních programů možný.

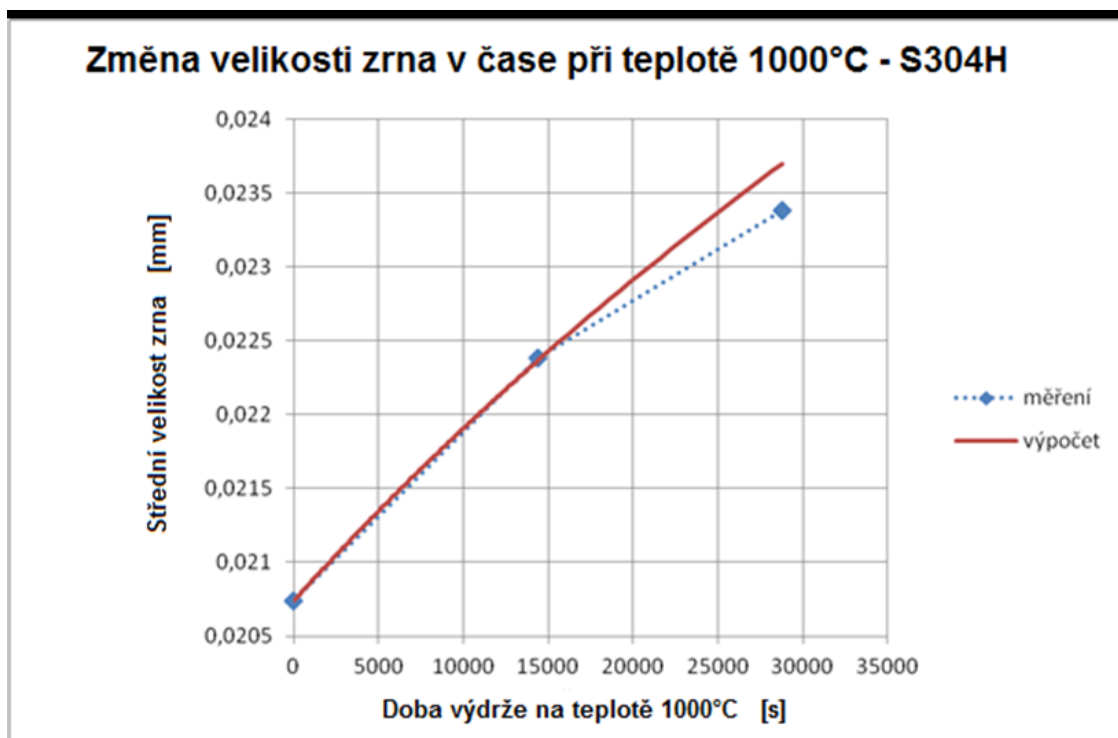


Obr. 24. Kinetika rozpouštění karbidů a nitridů pro jednotlivé expoziční teploty [161]

U simulačních programů svařování a tepelného zpracování také v současnosti neexistuje ucelený metodický postup, jakým je možné získat vstupní parametry potřebné pro simulace růstu zrna. Proto jsou pro uvedený typ simulací velmi často využívány vstupní údaje z materiálových databází (pokud je tyto databáze obsahují), nebo je použit postup doporučený uživatelskými manuály a popsany v kapitole 7.2. Tedy použít hodnotu variabilního exponentu $m = 4$, konstantu $K_0 = 0,4948 \cdot 10^{14} [\text{mm}^4 \cdot \text{s}^{-1}]$ a poměr aktivační energie a plynové konstanty v rozmezí hodnot $Q/R = 65000$ až $78000 [\text{K}]$.

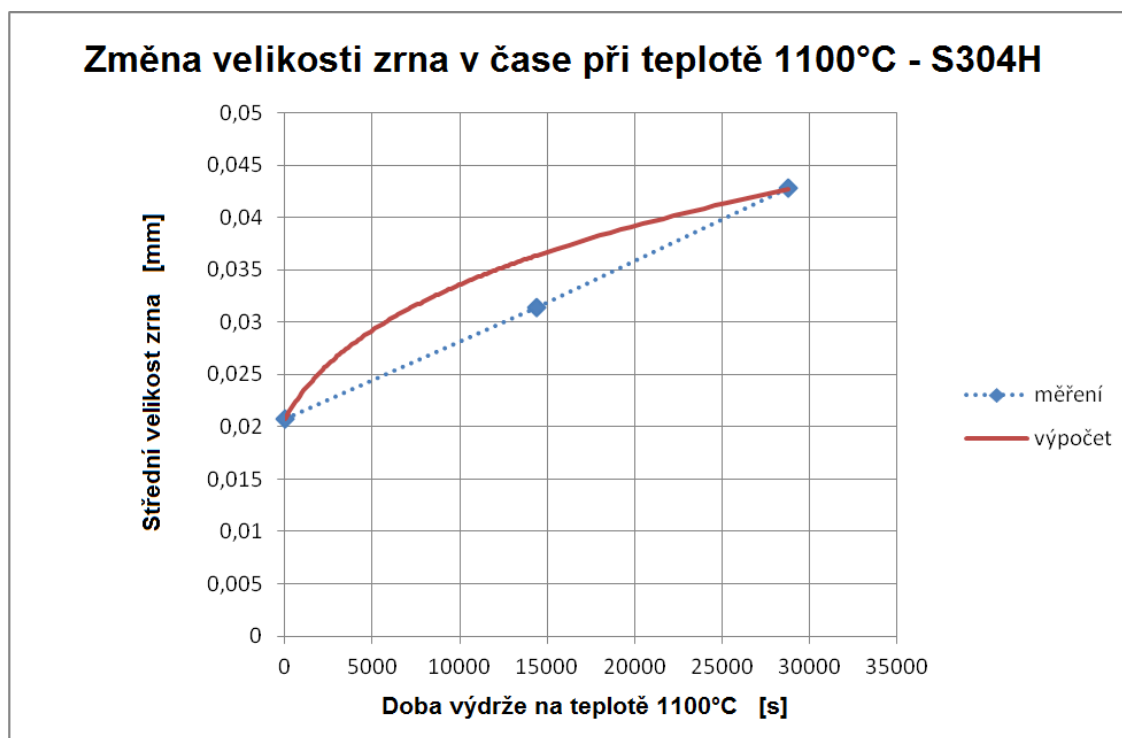
Pokud materiálová databáze neobsahuje pro daný materiál hodnotu aktivační energie, respektive poměru Q/R , je možné provést odhad vhodného poměru Q/R na základě experimentálně zhotovených vzorků pro alespoň dvě různé expoziční teploty a minimálně 2 výdrže na těchto teplotách [156]. Experimenty realizované pro tento způsob vyhodnocení byly popsány na začátku kapitoly 7.3.1. a jejich výsledky pro materiály HR3C, S304H, TP347HFG, P92 a T24 jsou uvedeny v přílohách 3.2. až 3.6.

Při experimentálním stanovení poměru Q/R jsou střední velikosti zrn pro tepelně neexponovaný vzorek a vzorky exponované při příslušné teplotě po dobu 4 a 8 hodin zaneseny do grafu, tak jak je ukázáno na obrázku 25. Ve shodě s rovnicí (32) je pak pro příslušnou expoziční teplotu T hledán ideální poměr Q/R vykazující minimální odchylku funkce od experimentálně zjištěných středních velikostí zrn dosažených při teplotě T . Hodnoty exponentu m a konstanty K_0 byly do rovnice (32) dosazeny v souladu s doporučeními v uživatelských manuálech, tedy $m = 4$ a $K_0 = 0,4948 \cdot 10^{14}$.



Obr. 25. Výpočetně predikované velikosti zrn. Teplota 1000°C, poměr $Q/R=73400$ [K] [156]

Na obrázku 25 jsou ukázány výsledky s optimalizovanou hodnotou poměru Q/R získané pro materiál S304H a expoziční teplotu 1000°C. Na obrázku 26 je ukázáno totéž, ovšem pro expoziční teplotu 1100°C. Modré body na obrázcích 25 a 26 znázorňují střední velikosti zrn, experimentálně zjištěné pro základní materiál a pro teplotně exponované vzorky. Červená křivka pak značí výpočetně predikované velikosti zrn při výdrži na příslušné teplotě pro optimalizovanou hodnotu poměru Q/R . Uvedenými postupy byl pro materiál S304H a teplotu 1000°C získán poměr $Q/R=73400$ [K] a pro teplotu 1100°C byl získán poměr $Q/R=74800$ [K]. Díky tomuto způsobu stanovení poměru Q/R však vyvstal problém s definováním dosažených vstupních údajů do výpočetního modelu podle rovnice (30). Pro v současnosti používané výpočetní modely je totiž možné zadat pouze jednu hodnotu aktivační energie Q , respektive poměru Q/R . Proto byla pro simulační výpočty na materiálu S304H použita průměrná hodnota z obou měření, tedy $Q/R=74100$ [K]. Hodnoty poměrů Q/R jsou pro ostatní materiály HR3C, TP347HFG, P92 a P24 uvedeny v tabulce v příloze 3.1.



Obr. 26. Výpočetně predikované velikosti zrn. Teplota 1100°C, poměr $Q/R=74800$ [K] [156]

Z uvedeného popisu a obrázků 25 a 26 je zřejmé, že přesnost predikovaných hodnot velikosti austenitického zrna nebude dostatečná, zejména při simulacích dlouhodobějších dějů, při nichž je materiál vystaven teplotám vyšším než 1000°C. V následujícím textu proto bude popsán metodický postup umožňující získat pro testovaný materiál jedinou konkrétní hodnotu aktivační energie Q a také konkrétní hodnotu konstanty K_0 využitelnou pro simulace růstu zrna. Takto získané údaje jsou vhodné pro simulace dějů s delšími expozičními časy při teplotách převyšujících 900°C. Podstata této metodiky vznikla při simulacích růstu zrna při objemovém tváření. Výstupy uvedeného postupu proto byly upraveny tak, aby mohla být získaná data aplikována na simulace tavného svařování a tepelného zpracování.

V kapitole 7.3.3. byl ukázán způsob vyhodnocení střední velikosti zrna pro jeden konkrétní vzorek. Aby však bylo možné experimentálně určit hodnotu aktivační energie Q a konstanty K_0 , je nezbytné mít dispozici vzorky pro alespoň dvě různé expoziční teploty a minimálně 2 výdrže na těchto teplotách [156]. Lépe je však využít větší soubor vzorků, umožňující přesnější stanovení požadovaných hodnot. Proto byl pro experimentální část práce navržen soubor 16 vzorků exponovaných při čtyřech různých teplotách a čtyřech výdržích na těchto teplotách, tak jak bylo naznačeno v plánu experimentů (tab. 27). Navíc je vhodné, z důvodů uvedených v kapitole 7.3.1., provést na každém vzorku měření pro příčný i podélný směr a to v alespoň dvou místech. Pro jeden materiál je tak k dispozici soubor až 64 údajů o velikosti zrna. V následujících tabulkách 29 a 30 jsou uvedeny údaje získané při vyhodnocení tepelně exponovaných vzorků planimetrickou metodou u materiálu S304H.

Tab. 29. Údaje o velikosti zrna na materiálu S304H pro základní materiál a teploty 900 a 1000°C

| S304H | | | Počet zrn na mm ² [-] | Střední plocha zrna [mm ²] | G2 | Jmenovitá střední velikost zrna [mm] | Skutečná střední velikost zrna [mm] | D _{střední} [mm] |
|-------------------|--------|-------------|--|--|-----|---|--|------------------------------|
| Základ. mat. | Podél. | 1 - Po | 2458,5 | 0,000406752 | 8-9 | 0,01885 | 0,02017 | 0,02040 |
| | | | 2277,1 | 0,000439155 | 8 | 0,02210 | 0,02096 | |
| | Příčné | 1 - Př | 2325,7 | 0,000429971 | 8 | 0,02210 | 0,02074 | |
| | | | 2569,3 | 0,000389211 | 8-9 | 0,01885 | 0,01973 | |
| 900°C 30 min | Podél. | I - 1 - Po | 2294,6 | 0,000435806 | 8 | 0,02210 | 0,02087 | 0,02063 |
| | | | 2411,2 | 0,000414731 | 8 | 0,02210 | 0,02037 | |
| | Příčné | I - 1 - Př | 2378,9 | 0,000420362 | 8 | 0,02210 | 0,02050 | |
| | | | 2316,7 | 0,000431648 | 8 | 0,02210 | 0,02078 | |
| 900°C 120 min | Podél. | I - 1 - Po | 2394,0 | 0,000417711 | 8-9 | 0,01885 | 0,02044 | 0,02079 |
| | | | 2301,4 | 0,000434518 | 8 | 0,02210 | 0,02085 | |
| | Příčné | I - 1 - Př | 2237,8 | 0,000446867 | 8 | 0,02210 | 0,02114 | |
| | | | 2325,3 | 0,000430052 | 8 | 0,02210 | 0,02074 | |
| 900°C 240 min | Podél. | I - 1 - Po | 2196,7 | 0,000455228 | 8 | 0,02210 | 0,02134 | 0,02126 |
| | | | 2278,3 | 0,000438924 | 8 | 0,02210 | 0,02095 | |
| | Příčné | I - 1 - Př | 2081,9 | 0,000480330 | 8 | 0,02210 | 0,02192 | |
| | | | 2303,2 | 0,000434179 | 8 | 0,02210 | 0,02084 | |
| 900°C 480 min | Podél. | I - 1 - Po | 2168,1 | 0,000461233 | 8 | 0,02210 | 0,02148 | 0,02143 |
| | | | 2254,5 | 0,000443557 | 8 | 0,02210 | 0,02106 | |
| | Příčné | I - 1 - Př | 2132,9 | 0,000468845 | 8 | 0,02210 | 0,02165 | |
| | | | 2157,3 | 0,000463542 | 8 | 0,02210 | 0,02153 | |
| 1000°C 30 min | Podél. | II - 1 - Po | 2287,4 | 0,000437178 | 8 | 0,02210 | 0,02091 | 0,02081 |
| | | | 2311,1 | 0,000432694 | 8 | 0,02210 | 0,02080 | |
| | Příčné | II - 1 - Př | 2340,8 | 0,000427204 | 8 | 0,02210 | 0,02067 | |
| | | | 2297,9 | 0,000435180 | 8 | 0,02210 | 0,02087 | |
| 1000°C 120 min | Podél. | II - 1 - Po | 2138,2 | 0,000467683 | 8 | 0,02210 | 0,02162 | 0,02178 |
| | | | 2032,4 | 0,000492029 | 8 | 0,02210 | 0,02218 | |
| | Příčné | II - 1 - Př | 2087,1 | 0,000479134 | 8 | 0,02210 | 0,02189 | |
| | | | 2178,9 | 0,000458947 | 8 | 0,02210 | 0,02142 | |
| 1000°C 240 min | Podél. | II - 1 - Po | 2045,5 | 0,000488888 | 8 | 0,02210 | 0,02211 | 0,02211 |
| | | | 1949,6 | 0,000512934 | 8 | 0,02210 | 0,02264 | |
| | Příčné | II - 1 - Př | 2013,8 | 0,000496574 | 8 | 0,02210 | 0,02228 | |
| | | | 2184,2 | 0,000457834 | 8 | 0,02210 | 0,02140 | |
| 1000°C 480 min | Podél. | II - 1 - Po | 1705,1 | 0,000586476 | 8 | 0,02210 | 0,02422 | 0,02396 |
| | | | 1684,5 | 0,000593648 | 8 | 0,02210 | 0,02436 | |
| | Příčné | II - 1 - Př | 1817,6 | 0,000550176 | 8 | 0,02210 | 0,02346 | |
| | | | 1765,1 | 0,000566540 | 8 | 0,02210 | 0,02380 | |

G2 - Číslo velikosti zrna vyhodnocené planimetrickou metodou

D_{střední} – Průměrná hodnota skutečné střední velikosti zrna

Tab. 30. Údaje o velikosti zrna na materiálu S304H pro teploty 1100 a 1200°C

| S304H | | | Počet zrn na mm ² [-] | Střední plocha zrna [mm ²] | G2 | Jmenovitá střední velikost zrna [mm] | Skutečná střední velikost zrna [mm] | D _{střední} [mm] |
|-------------------|--------|--------------|--|--|-----|---|--|------------------------------|
| 1100°C 30 min | Podél. | III - 1 - Po | 1211,3 | 0,000825559 | 7-8 | 0,02665 | 0,02873 | 0,02835 |
| | | | 1284,5 | 0,000778513 | 7-8 | 0,02665 | 0,02790 | |
| | Příčné | III - 1 - Př | 1324,8 | 0,000754831 | 7-8 | 0,02665 | 0,02747 | |
| | | | 1165,5 | 0,000858001 | 7 | 0,03120 | 0,02929 | |
| 1100°C 120 min | Podél. | III - 1 - Po | 993,1 | 0,001006948 | 7 | 0,03120 | 0,03173 | 0,03093 |
| | | | 1065,8 | 0,000938262 | 7 | 0,03120 | 0,03063 | |
| | Příčné | III - 1 - Př | 1096,1 | 0,000912326 | 7 | 0,03120 | 0,03020 | |
| | | | 1030,5 | 0,000970403 | 7 | 0,03120 | 0,03115 | |
| 1100°C 240 min | Podél. | III - 1 - Po | 847,8 | 0,001179459 | 7 | 0,03120 | 0,03434 | 0,03275 |
| | | | 949,0 | 0,001053779 | 7 | 0,03120 | 0,03246 | |
| | Příčné | III - 1 - Př | 1011,2 | 0,000988931 | 7 | 0,03120 | 0,03145 | |
| | | | 932,5 | 0,001072386 | 7 | 0,03120 | 0,03275 | |
| 1100°C 480 min | Podél. | III - 1 - Po | 606,3 | 0,001649349 | 7 | 0,03120 | 0,04061 | 0,04113 |
| | | | 627,4 | 0,001593880 | 7 | 0,03120 | 0,03992 | |
| | Příčné | III - 1 - Př | 591,2 | 0,001691592 | 6-7 | 0,03770 | 0,04113 | |
| | | | 544,5 | 0,001836586 | 6-7 | 0,03770 | 0,04286 | |
| 1200°C 30 min | Podél. | IV - 1 - Po | 1123,2 | 0,000890313 | 7 | 0,03120 | 0,02984 | 0,03078 |
| | | | 1047,7 | 0,000954472 | 7 | 0,03120 | 0,03089 | |
| | Příčné | IV - 1 - Př | 993,1 | 0,001006948 | 7 | 0,03120 | 0,03173 | |
| | | | 1064,1 | 0,000939761 | 7 | 0,03120 | 0,03066 | |
| 1200°C 120 min | Podél. | IV - 1 - Po | 704,9 | 0,001418641 | 7 | 0,03120 | 0,03766 | 0,03971 |
| | | | 613,2 | 0,001630789 | 7 | 0,03120 | 0,04038 | |
| | Příčné | IV - 1 - Př | 598,6 | 0,001670565 | 7 | 0,03120 | 0,04087 | |
| | | | 627,5 | 0,001593625 | 7 | 0,03120 | 0,03992 | |
| 1200°C 240 min | Podél. | IV - 1 - Po | 519,7 | 0,001924187 | 6-7 | 0,03770 | 0,04387 | 0,04376 |
| | | | 576,1 | 0,001735810 | 6-7 | 0,03770 | 0,04166 | |
| | Příčné | IV - 1 - Př | 494,3 | 0,002023063 | 6-7 | 0,03770 | 0,04498 | |
| | | | 504,2 | 0,001983340 | 6-7 | 0,03770 | 0,04453 | |
| 1200°C 480 min | Podél. | IV - 1 - Po | 407,4 | 0,002454590 | 6 | 0,04420 | 0,04954 | 0,05114 |
| | | | 391,2 | 0,002556237 | 6 | 0,04420 | 0,05056 | |
| | Příčné | IV - 1 - Př | 379,5 | 0,002635046 | 6 | 0,04420 | 0,05133 | |
| | | | 354,3 | 0,002822467 | 6 | 0,04420 | 0,05313 | |

G2 - Číslo velikosti zrna vyhodnocené planimetrickou metodou

D_{střední} – Průměrná hodnota skutečné střední velikosti zrna

U každého z hodnocených vzorků je v tabulkách 29 a 30 uvedena teplota expozice a doba výdrže na této teplotě, ale také zda bylo vyhodnocení provedeno v příčném či podélném směru. Kromě toho jsou v uvedených tabulkách doplněny údaje odečtené z tabulky 28, jako

jsou číslo velikosti zrna G , střední plocha zrna a jmenovitá střední velikost zrna. K dalšímu zpracování však budou využity pouze reálně změřené údaje, jako je průměrná hodnota skutečné střední velikosti zrna daného vzorku označená jako $D_{\text{střední}}$.

Tabulky s výsledky vyhodnocení pro ostatní materiály jsou uvedeny v příloze. Pro bainitickou ocel P24 se jedná o přílohy 3.7. a 3.8., pro martenzitickou ocel P92 o přílohy 3.9. a 3.10., pro austenitické materiály HR3C a TP347HFG o přílohy 3.11. a 3.12. respektive 3.13. a 3.14.

Údaje z tabulek 29 a 30 je již možné použít ke stanovení hodnoty aktivační energie Q a konstanty K_0 . Metodický postup je však navržen tak, že jsou nejprve určeny dílčí konstanty úměrnosti K , charakteristické pro každou z použitých expozičních teplot. Tyto hodnoty budou v následujícím textu označeny symbolem K_T [$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$] a budou odečteny ze směrnice regresní přímky při dané teplotě, tak jak je ukázáno na obrázku 27. Hodnoty K_T získané pro jednotlivé teploty budou dále využity ke stanovení aktivační energie Q a konstanty K_0 pro materiál S304H v souladu s obrázkem 28. Protože jsou při zpracování použity pouze průměrné hodnoty skutečné střední velikosti zrna $D_{\text{střední}}$, respektive jejich druhé mocniny definující průměrné hodnoty skutečné střední plochy zrna $A_{\text{střední}}$, byly tyto údaje z důvodu přehlednosti zpracovány do tabulek 31 a 32.

Tab. 31. Průměrné hodnoty skutečné střední velikosti zrna $D_{\text{střední}}$ [mm] pro materiál S304H

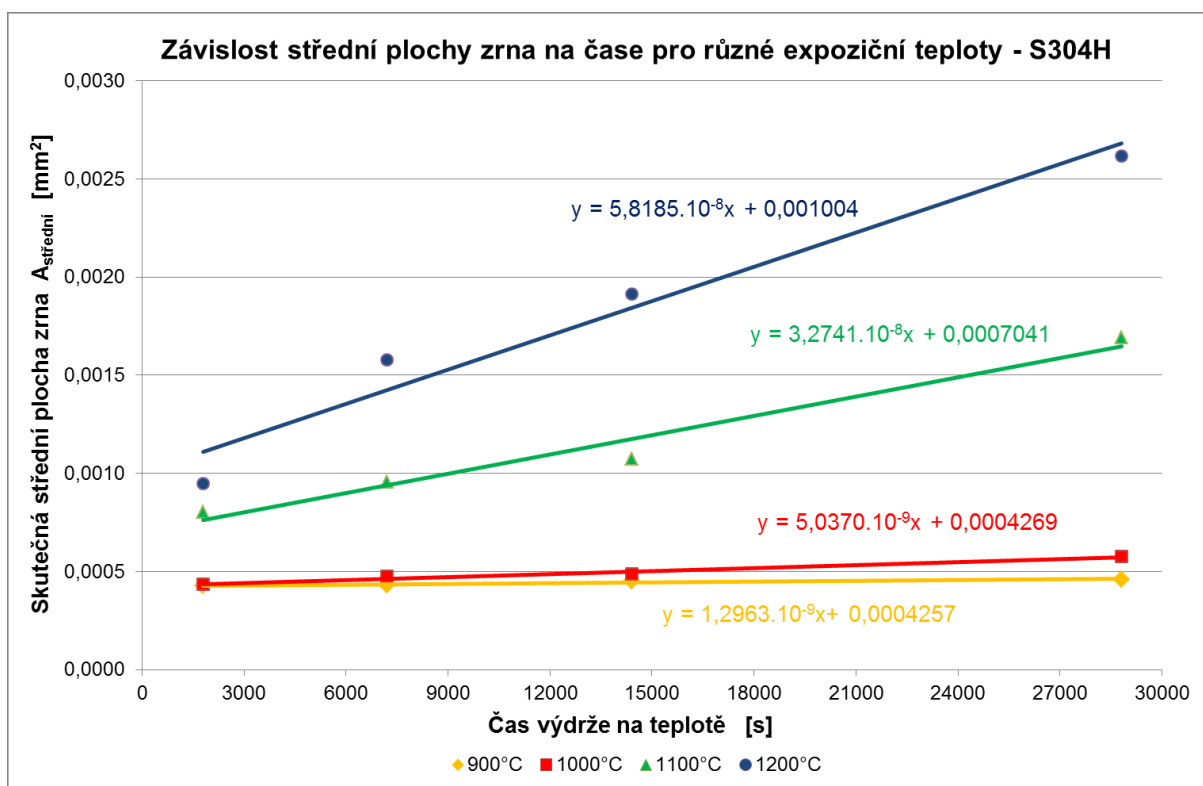
| Teplota expoziční | Délka výdrže na příslušné teplotě | | | |
|----------------------|-----------------------------------|----------|-----------|-----------|
| | 1800 [s] | 7200 [s] | 14400 [s] | 28800 [s] |
| 900 [°C] | 0,02063 | 0,02079 | 0,02126 | 0,02143 |
| 1000 [°C] | 0,02081 | 0,02178 | 0,02211 | 0,02396 |
| 1100 [°C] | 0,02835 | 0,03093 | 0,03275 | 0,04113 |
| 1200 [°C] | 0,03078 | 0,03971 | 0,04376 | 0,05114 |

Tab. 32. Průměrné hodnoty skutečné střední plochy zrna $A_{\text{střední}}$ [mm^2] pro materiál S304H

| Teplota expoziční | Délka výdrže na příslušné teplotě | | | |
|----------------------|-----------------------------------|------------|------------|------------|
| | 1800 [s] | 7200 [s] | 14400 [s] | 28800 [s] |
| 900 [°C] | 0,00042560 | 0,00043222 | 0,00045199 | 0,00045925 |
| 1000 [°C] | 0,00043306 | 0,00047437 | 0,00048885 | 0,00057408 |
| 1100 [°C] | 0,00080372 | 0,00095667 | 0,00107256 | 0,00169168 |
| 1200 [°C] | 0,00094741 | 0,00157688 | 0,00191494 | 0,00261530 |

Způsob získání hodnot K_T pro jednotlivé expoziční teploty je zřejmý z obrázku 27. Do grafu byly v souladu s tabulkou 32 zaneseny jednotlivé experimentálně zjištěné průměrné hodnoty skutečné střední plochy zrna $A_{\text{střední}}$. Každá z expozičních teplot je v grafu znázorněna lineární regresní závislostí a její rovnicí. Ze sklonu regresní přímky je pak možné odečíst příslušnou hodnotu K_T . Například pro teplotu výdrže 1200°C byla u materiálu S304H stanovena hodnota $K_T = 5,8185 \cdot 10^{-8}$ [$\text{mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$]. Tato hodnota definuje, o kolik se zvětší střední plocha zrna $A_{\text{střední}}$ za jednu sekundu při expoziční teplotě 1200°C. To znamená, že

po expoziční době 27000 sekund (odpovídající časovému intervalu 1800 až 28800 sekund) dojde podle takto stanovené hodnoty K_T ke zvětšení střední plochy zrna o $0,001571 \text{ mm}^2$. U experimentálně získaných údajů (tab. 32) činí rozdíl mezi skutečnými středními plochami zrna pro uvedený časový interval hodnotu $0,001668 \text{ mm}^2$. Rozdíl je tedy necelých 6 %.



Obr. 27. Závislost průměrné hodnoty skutečné střední plochy zrna $A_{\text{střední}}$ na čase výdrže pro austenitickou ocel S304H. Použité expoziční teploty 900°C, 1000°C, 1100°C a 1200°C.

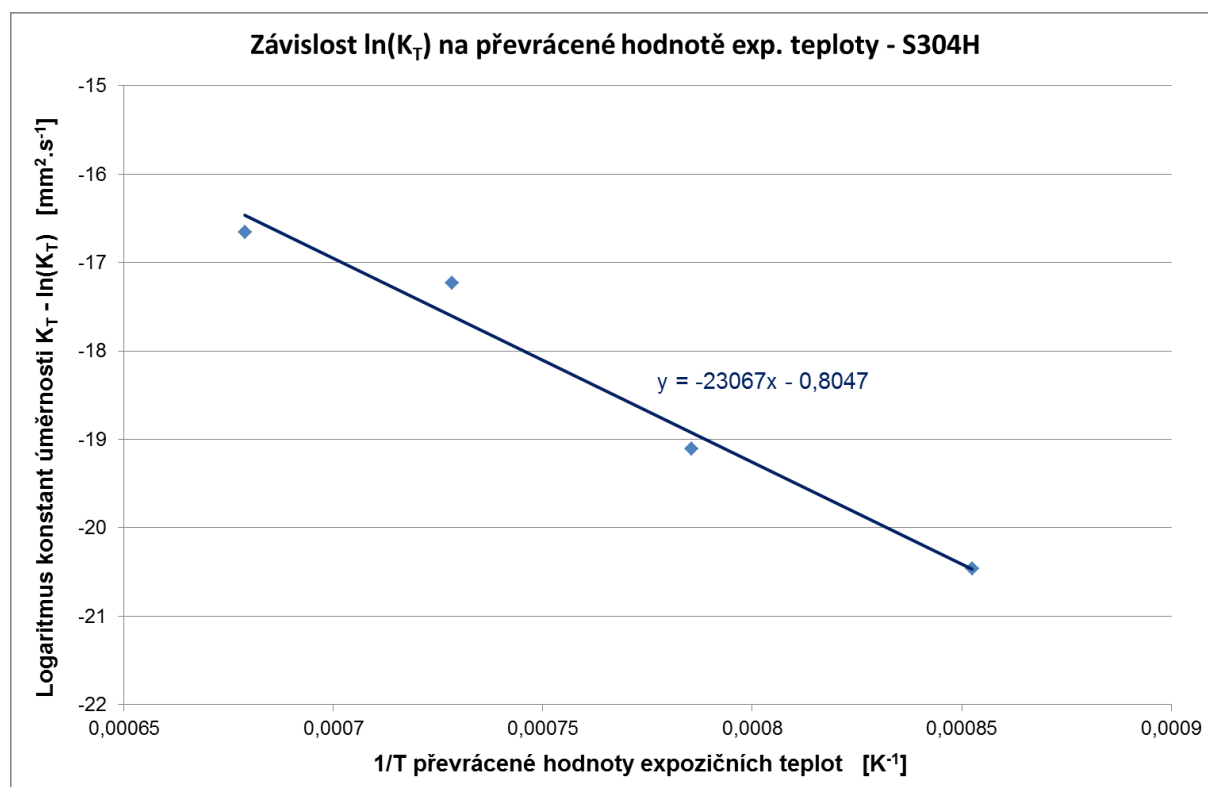
Na základě experimentálně stanovených dat je také možné odhadnout, jaká bude střední plocha zrna v čase $t = 0$ sekund, tedy po dosažení expoziční teploty. Tento údaj může být interpretován také jako střední plochy zrna, již bude dosaženo po aplikaci svařovacího cyklu s maximem odpovídající hodnotě expoziční teploty. Tento údaj bude dále v textu označován symbolem A_{T0} [mm^2]. Pro teplotu výdrže 1200°C a materiál S304H by byla hodnota $A_{T0} = 0,001004$ [mm^2].

K potvrzení uvedeného předpokladu byly na vzorcích z materiálu S304H realizovány verifikační experimenty simulující teplotní cykly s rychlostí ohřevu $100^\circ\text{C} \cdot \text{s}^{-1}$, rychlostí ochlazování $50^\circ\text{C} \cdot \text{s}^{-1}$ a maximy odpovídajícími teplotám 900, 1000, 1100, a 1200°C. Vyhodnocené výsledky uvedených experimentů pro střední plochu zrna $A_{T\text{exp.}}$, střední velikost zrna $D_{T\text{exp.}}$ Jsou uvedeny v tabulce 33. Pro porovnání jsou v tab. 33 uvedeny také hodnoty K_T a A_{T0} odečtené z rovnic regresních přímek na obrázku 27. Dále jsou v tabulce uvedeny také přirozené logaritmy hodnot K_T a převrácené hodnoty expozičních teplot vyjádřených v Kelvinech $1/T$ [K^{-1}]. Tyto údaje byly využity ve druhé fázi metodického postupu pro stanovení vstupních údajů numerických simulací růstu zrna.

Tab. 33. Číselné hodnoty údajů K_T , A_{T0} , $A_{Texp.}$, $D_{Texp.}$, $\ln K_T$ a T^{-1} pro materiál S304H

| S304H | Expoziční teplota | | | |
|---|-------------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|
| | 900 [°C] | 1000 [°C] | 1100 [°C] | 1200 [°C] |
| K_T [mm ² .s ⁻¹] | 1,2963.10 ⁻⁹ | 5,0370.10 ⁻⁹ | 3,2741.10 ⁻⁸ | 5,8185.10 ⁻⁸ |
| A_{T0} [mm ²] | 0,0004257 | 0,0004269 | 0,0007041 | 0,0010040 |
| $A_{Texp.}$ [mm ²] | 0,0004264 | 0,0004207 | 0,0007173 | 0,0009513 |
| $D_{Texp.}$ [mm ²] | 0,02065 | 0,02051 | 0,02678 | 0,03084 |
| $\ln K_T$ [mm ² .s ⁻¹] | -20,4638 | -19,1065 | -17,2346 | -16,6596 |
| T^{-1} [K ⁻¹] | 0,0008525 | 0,0007855 | 0,000728 | 0,0006789 |

Druhá fáze vyhodnocení je určena ke stanovení hodnot aktivační energie Q a konstanty K_0 . K tomu je třeba použít údaje obsažené v tabulce 33, kdy jsou na x-ovou osu vynášeny převrácené hodnoty použité expoziční teploty v kelvinech a na y-ovou osu přirozený logaritmus hodnot K_T získaných při příslušných expozičních teplotách [140]. Vytvořenými body je proložena regresní přímka (obr. 28), jejíž matematický popis umožní za pomoci rovnic (44) a (45) stanovit hodnoty aktivační energie Q a konstanty K_0 . Princip realizace postupu je zřejmý z obrázku 28.


Obr. 28. Způsob získání konstanty K_0 a aktivační energie růstu zrn Q

Rovnici regresní přímky získanou v souladu s postupem uvedeným na obrázku 28, je možné obecně vyjádřit ve formátu (43).

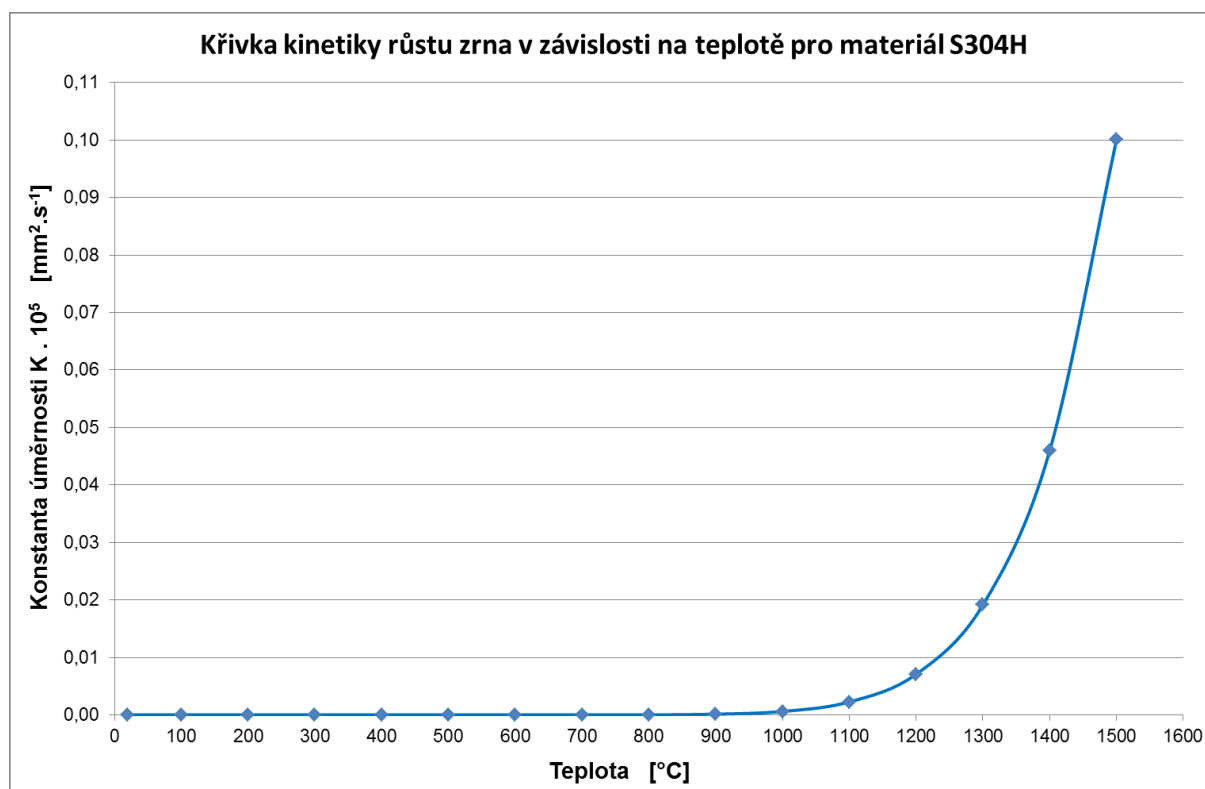
$$y = C \cdot x + B \quad (43)$$

Konstanta C v rovnici (43) definuje sklon regresní přímky a společně s plynovou konstantou R je dále využita k výpočtu hodnoty aktivační energie Q ve shodě s rovnicí (44). Konstanta B v rovnici (43) je využita ke stanovení hodnoty konstanty K_0 , v souladu s rovnicí (45).

$$Q = -(R \cdot C) \quad (44)$$

$$K_0 = e^B \quad (45)$$

Z údajů rovnice regresní přímky (obr. 28) a s pomocí rovnic (44) a (45) byly pro materiál S304H získány hodnoty aktivační energie růstu zrna $Q = 191790 \text{ [J.mol}^{-1}\text{]}$ a konstanty $K_0 = 44,722 \cdot 10^{-2} \text{ [mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}\text{]}$. Tyto údaje již mohou být vloženy jako vstupní data do simulačního programu. Uvedené údaje jsou v souladu s rovnicí (30) simulačními programy automaticky použity k definování teplotní závislosti konstanty úměrnosti K , známé také jako křivka kinetiky růstu zrna. Na obrázku 29 je ukázáno, jak vypadá simulačním programem vygenerovaná křivka kinetiky růstu zrna pro materiál S304H. Z obrázku je zřejmé, že k intenzivnějšímu růstu zrna dochází již při teplotách nad 900°C , přičemž s rostoucí teplotou se zvyšuje kinetika jejich růstu.



Obr. 29. Křivka kinetiky růstu zrna pro materiál S304H generovaná simulačním programem a vynásobená hodnotou 10^5

V tabulce 34 jsou uvedeny hodnoty konstanty úměrnosti K pro jednotlivé teploty, získané pomocí vzorce (30). Tyto údaje mohou dát představu o předpokládané rychlosti růstu zrna při jednotlivých expozičních teplotách. Bylo experimentálně prokázáno, že u materiálu

S304H došlo po ohřevu a dvou hodinách výdrže na expoziční teplotě 1200°C ke zvětšení střední velikosti zrna $D_{\text{střední}}$ z původní hodnoty 0,02040 mm na hodnotu 0,03971 mm. Pomocí získaných hodnot konstanty úměrnosti K lze pro stejné podmínky predikovat střední velikosti zrna $D_{\text{střední}} = 0,04196$ mm. Stejným způsobem je možné například také určit, jaký časový interval by byl potřebný k dosažení stejného růstu zrna při dalších teplotách. Růst zrna je podmíněn difúzí substitučních atomů. Pokud k této difúzi nedochází, zrna již nemohou dále růst.

Tab. 34. Hodnoty pro definování křivky kinetiky růstu zrna K pro materiál S304H

| Teplota [°C] | 20 | 100 | 200 | 300 | 400 | 500 |
|---------------------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|
| $K [\text{mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}]$ | $2,883 \cdot 10^{-35}$ | $6,208 \cdot 10^{-28}$ | $2,958 \cdot 10^{-22}$ | $1,470 \cdot 10^{-18}$ | $5,822 \cdot 10^{-16}$ | $4,907 \cdot 10^{-14}$ |
| Teplota [°C] | 600 | 700 | 800 | 900 | 1000 | 1100 |
| $K [\text{mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}]$ | $1,497 \cdot 10^{-12}$ | $2,263 \cdot 10^{-11}$ | $2,062 \cdot 10^{-10}$ | $1,289 \cdot 10^{-9}$ | $6,039 \cdot 10^{-9}$ | $2,260 \cdot 10^{-8}$ |
| Teplota [°C] | 1200 | 1300 | 1400 | 1500 | - | - |
| $K [\text{mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}]$ | $6,459 \cdot 10^{-8}$ | $1,914 \cdot 10^{-7}$ | $4,598 \cdot 10^{-7}$ | $1,001 \cdot 10^{-6}$ | - | - |

7.3.5. Vliv rozsahu vstupních údajů na výslednou hodnotu konstanty úměrnosti K

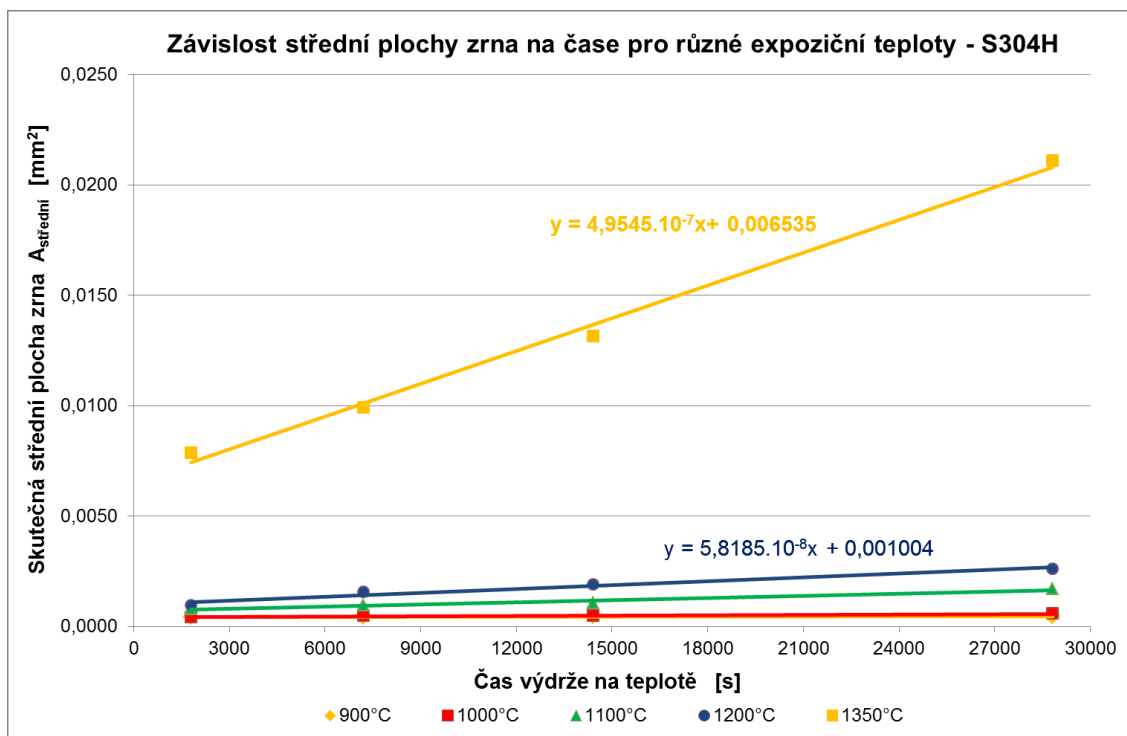
V kapitole 7.3.4. byl ukázán způsob stanovení hodnot aktivační energie Q a konstanty K_0 pro materiál S304H na základě experimentů při teplotách 900, 1000, 1100 a 1200°C. Aby bylo možné deklarovat použitelnost a aplikovatelnost uvedených postupů i na teploty vyšší než 1200°C, byly dodatečně dodělané experimenty růstu zrna pro materiál S304H při expoziční teplotě 1350°C a dobách výdrže 0,5; 2; 4 a 8 hodin. Realizaci těchto testů již nebylo možné realizovat ve vakuu jako v předchozích případech, ale musela být použita ochranná inertní atmosféra, v tomto případě Ar o čistotě 99,999%. Také musely být použity řídicí termočlánky typu R. Získané vzorky byly zpracovány postupy uvedenými v kapitole 7.3.3. a vyhodnoceny planimetrickou metodou. V tabulce 35 jsou uvedeny střední velikosti zrna $D_{\text{střední}}$ [mm] a střední plochy zrna $A_{\text{střední}}$ [mm²] pro materiál S304H získané uvedenými postupy.

Tab. 35. Hodnoty $D_{\text{střední}}$ [mm] a $A_{\text{střední}}$ [mm²] dosažené při teplotě 1350°C - materiál S304H

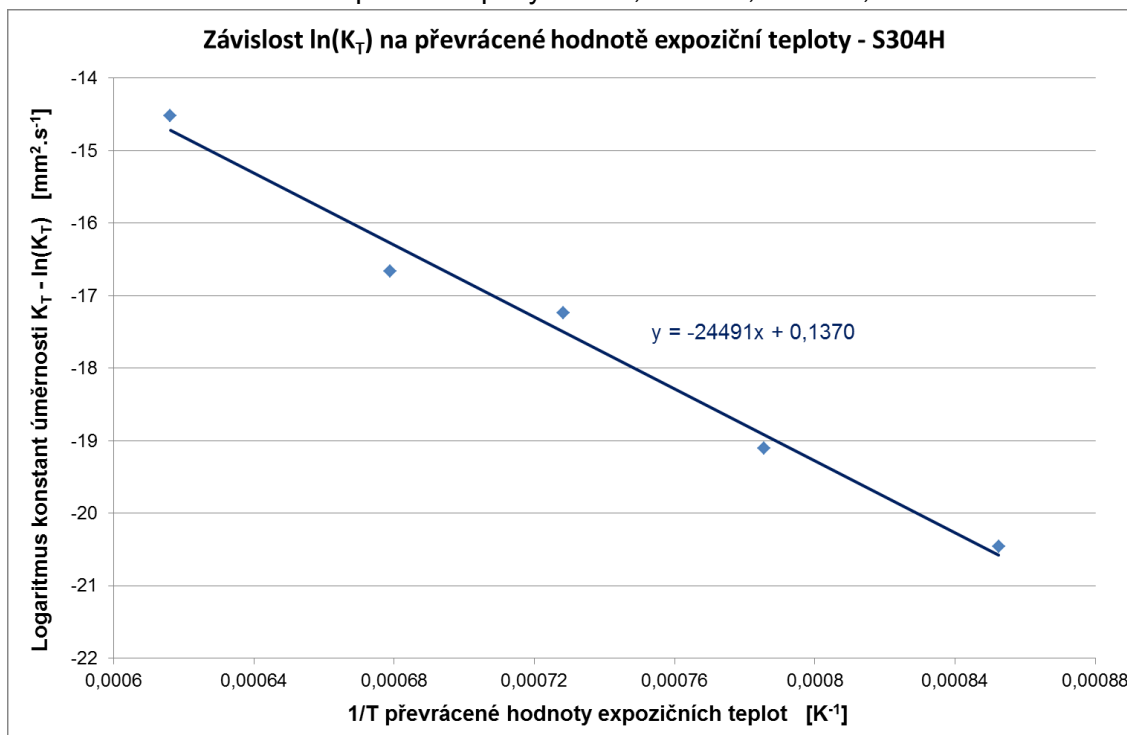
| S304H | Délka výdrže na teplotě 1350°C | | | |
|---|--------------------------------|----------|-----------|-----------|
| | 1800 [s] | 7200 [s] | 14400 [s] | 28800 [s] |
| $D_{\text{střední}}$ [mm] | 0,08858 | 0,09963 | 0,11466 | 0,14520 |
| $A_{\text{střední}}$ [mm ²] | 0,00785 | 0,00993 | 0,01315 | 0,02108 |

Do grafu na obrázku 27 byly přidány hodnoty $A_{\text{střední}}$ z tabulky 35. Regresní závislost pro teplotu 1350°C byla získána stejným způsobem jako u předchozích teplot. Na obrázku 30 je ukázána nově vytvořená regresní přímka a její rovnice. Ze sklonu přímky byla odečtena konstanta úměrnosti při teplotě 1350°C $K_T = 4,9545 \cdot 10^{-7} [\text{mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}]$. Konstanta K_T byla

zlogaritmována a získaná hodnota $\ln K_T = -14,5178 \text{ [mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}]$ společně s obrácenou hodnotou teploty expozice $T^{-1} = 0,000616 \text{ [K}^{-1}]$ byly zaneseny do grafu na obr. 31.



Obr. 30. Závislost skutečné střední plochy zrna $A_{\text{střední}}$ na čase výdrže pro austenitickou ocel S304H. Použité expoziční teploty 900°C, 1000°C, 1100°C, 1200°C a 1350°C



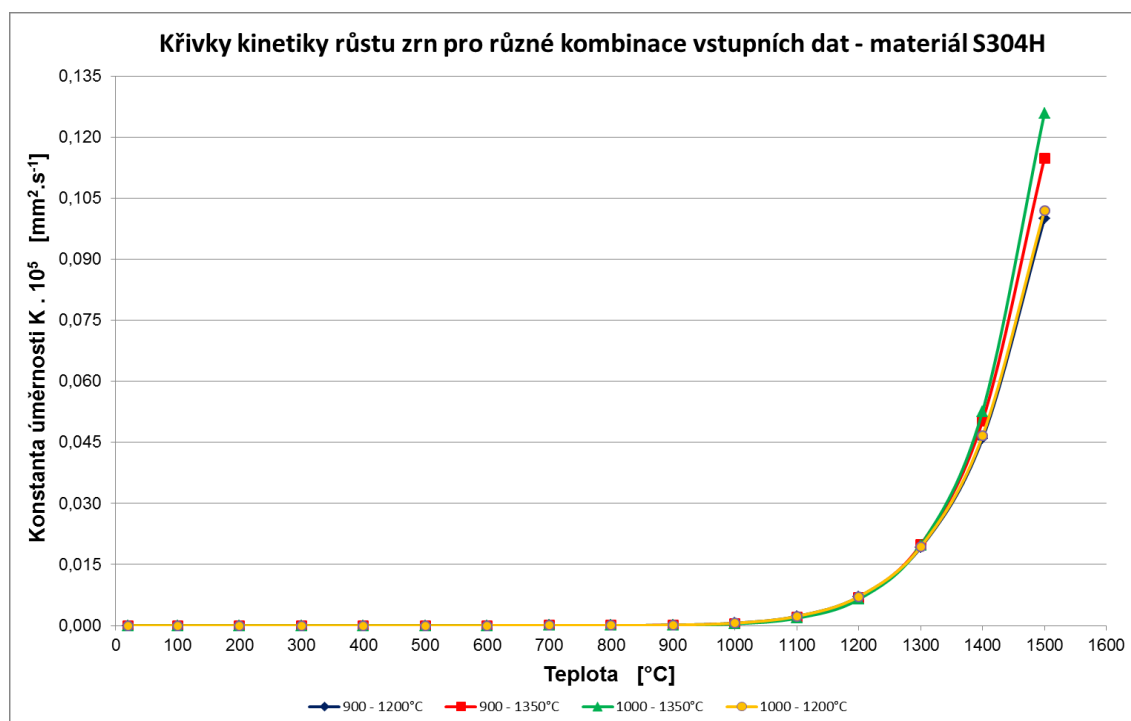
Obr. 31. Stanovení nových hodnot konstanty K_0 a aktivační energie Q se zahrnutím výsledků experimentů při expoziční teplotě 1350°C – materiál S304H

Na obrázku 31 je ukázáno zahrnutí konstanty K_T získané při teplotě 1350°C při novém stanovení hodnot aktivační energie Q a konstanty K_0 . Z rovnice regresní přímky a za pomoci rovnic (44) a (45) byly stanoveny nové hodnoty aktivační energie $Q = 203630 \text{ [J.mol}^{-1}\text{]}$ a konstanty $K_0 = 1,14683 \text{ [mm}^2\text{.s}^{-1}\text{]}$. V této chvíli však ještě není možné posoudit, jak moc se projevilo zahrnutí teploty 1350°C do metodického postupu, protože obě získané hodnoty Q a K_0 jsou vzájemně propojeny ve výpočtu konstanty úměrnosti K podle vzorce (30).

Pro posouzení vlivu množství vstupních údajů a teplot, při kterých byly získány na hodnotu konstanty úměrnosti K , byly hodnoty Q a K_0 stanoveny kromě rozmezí teplot 900 až 1200°C a 900 až 1350°C ještě pro vstupní údaje reprezentující rozmezí teplot 1000 až 1200°C a 1000 až 1350°C. V tabulce 36 jsou pro zmíněné teplotní intervaly vstupních dat uvedeny konstanty B a C získané z regresních přímek ve shodě s obrázky 28 a 31 a také hodnoty aktivační energie Q a konstanty K_0 stanovené pomocí rovnic (44) a (45).

Tab. 36. Hodnoty konstant B , C a hodnot Q a K_0 pro materiál S304H a různá vstupní data

| Data použitá pro následující teploty | konstanta B | konstanta C | $Q \text{ [kJ.mol}^{-1}\text{]}$ | $K_0 \text{ [mm}^2\text{.s}^{-1}\text{]}$ |
|--|-------------|-------------|----------------------------------|---|
| X1 (900;1000;1100;1200) [°C] | - 23067 | - 0,8047 | 191789,7 | 0,44722 |
| X2 (900;1000;1100;1200;1350) [°C] | - 24491 | 0,1370 | 203629,5 | 1,14683 |
| X3 (1000;1100;1200) [°C] | - 23195 | - 0,7134 | 192853,9 | 0,48998 |
| X4 (1000;1100;1200;1350) [°C] | - 25885 | 1,0151 | 215219,8 | 2,75964 |



Obr. 32. Křivky kinetiky růstu zrna pro různé rozsahy vstupních údajů u materiálu S304H generované simulačním programem a vynásobená hodnotou 10^5

Pro hodnoty aktivačních energií Q a konstant K_0 uvedených pro jednotlivé kombinace vstupních údajů v tabulce 36, byly získány křivky kinetiky růstu zrna ve shodě s rovnicí (30). Tyto údaje jsou graficky znázorněny na obrázku 32. Přestože byly použity značně rozdílné hodnoty aktivační energie Q a konstanty K_0 , z vygenerovaných teplotních závislostí konstanty úměrnosti K je zřejmé, že k výraznějším odchylkám mezi jednotlivými křivkami dochází až při teplotách překračujících 1350°C . Pro posouzení vlivu jednotlivých získaných křivek na růst zrna, byl ve shodě s rovnicí (32) proveden modelový příklad růstu zrna při expozičních teplotách 1000 až 1500°C . Expoziční doba jednotlivých teplot byla při tomto příkladu 120 minut. V tabulce 37 jsou uvedeny získané hodnoty zrna po 120 minutách výdrže na příslušných teplotách pro jednotlivé varianty vstupních dat X_1 , X_2 , X_3 a X_4 (viz. tab. 36).

Tab. 37. Přírůstky zrn pro varianty X_1 , X_2 , X_3 a X_4 a materiál S304H

| Teplota expoze [°C] | Přírůstek velikosti zrna při dané expoziční teplotě po 120 min. výdrže [mm] | | | |
|------------------------|---|----------|----------|----------|
| | X_1 | X_2 | X_3 | X_4 |
| 1000 | 0,006594 | 0,006036 | 0,005416 | 0,006564 |
| 1100 | 0,012757 | 0,012163 | 0,011356 | 0,012745 |
| 1200 | 0,022564 | 0,022283 | 0,021536 | 0,022614 |
| 1300 | 0,037120 | 0,037801 | 0,037646 | 0,037305 |
| 1400 | 0,057536 | 0,060200 | 0,061566 | 0,057963 |
| 1500 | 0,084880 | 0,090967 | 0,095244 | 0,085695 |

Z výsledků uvedených v tabulce 37 je zřejmé, že rozdíly ve velikosti zrn jsou u jednotlivých variant X_1 až X_4 pro expoziční teplotu 1200°C a dobu výdrže 120 minut menší než 5% a pro expoziční teplotu 1400°C je rozdíl méně než 6,5%. Největších rozdílů bylo dosaženo při teplotě 1500°C , kdy maximální rozdíl mezi jednotlivými variantami činil 12% a maximální rozdíl ve velikosti zrna 0,010364 mm.

7.3.6. Stanovení hodnot Q , K_0 a konstanty úměrnosti K pro ostatní materiály

V kapitole 7.3.4. byl ukázán způsob stanovení hodnot aktivační energie Q a konstanty K_0 pro materiál S304H. V následujícím textu bude uvedený způsob použit ke stanovení hodnot aktivační energie Q a konstanty K_0 také pro ostatní materiály HR3C, TP347HFG, P92 a P24. Po zhodnocení vlivu množství vstupních dat na křivku kinetiky růstu zrna uvedených v kapitole 7.3.5. bylo rozhodnuto, že jako vstupní údaje budou do metodického postupu zahrnuty velikosti zrn získané při teplotách 900 ; 1000 ; 1100 a 1200°C a výdržích na teplotě po dobu 0,5; 2; 4 a 8 hodin, tak jak bylo plánováno v tabulce 27. Jako vstupní údaje byly použity skutečné střední plochy zrna $A_{\text{střední}}$, odvozené ze skutečných středních velikostí zrn $D_{\text{střední}}$ obsažených pro ocel P24 v tabulkách v příloze 3.7. a 3.8., pro ocel P92 v tabulkách v příloze 3.9. a 3.10. a pro austenitické oceli HR3C a TP347HFG v tabulkách v příloze 3.11. a 3.12. respektive 3.13. a 3.14. V tabulkách 38 až 41 jsou proto uvedeny použité hodnoty

střední plochy zrna $A_{\text{střední}}$ pro oceli HR3C, TP347HFG, P92 a P24, odvozené dle vzorce (42) z průměrných hodnot skutečné střední velikosti zrna $D_{\text{střední}}$ uvedených v příloze 3.15.

Tab. 38. Průměrné hodnoty skutečné střední plochy zrna $A_{\text{střední}}$ [mm²] pro materiál HR3C

| Teplota expozice | Délka výdrže na příslušné teplotě | | | |
|------------------|-----------------------------------|-------------|-------------|-------------|
| | 1800 [s] | 7200 [s] | 14400 [s] | 28800 [s] |
| 900 [°C] | 0,004110092 | 0,004164121 | 0,004321748 | 0,004740323 |
| 1000 [°C] | 0,004495703 | 0,004958976 | 0,005246105 | 0,006807900 |
| 1100 [°C] | 0,005119403 | 0,006148128 | 0,006374426 | 0,007979849 |
| 1200 [°C] | 0,005505640 | 0,006298010 | 0,007819865 | 0,008952944 |

Tab. 39. Průměrné hodnoty skutečné střední plochy zrna $A_{\text{střední}}$ [mm²], materiál TP347HFG

| Teplota expozice | Délka výdrže na příslušné teplotě | | | |
|------------------|-----------------------------------|-------------|-------------|-------------|
| | 1800 [s] | 7200 [s] | 14400 [s] | 28800 [s] |
| 900 [°C] | 0,000567392 | 0,000568346 | 0,000577441 | 0,000599270 |
| 1000 [°C] | 0,000600740 | 0,000667189 | 0,000700661 | 0,000820823 |
| 1100 [°C] | 0,000709690 | 0,000795804 | 0,000832323 | 0,001107558 |
| 1200 [°C] | 0,000768953 | 0,000898800 | 0,001072563 | 0,001557092 |

Tab. 40. Průměrné hodnoty skutečné střední plochy zrna $A_{\text{střední}}$ [mm²] pro materiál P92

| Teplota expozice | Délka výdrže na příslušné teplotě | | | |
|------------------|-----------------------------------|-------------|-------------|-------------|
| | 1800 [s] | 7200 [s] | 14400 [s] | 28800 [s] |
| 900 [°C] | 0,000080282 | 0,000088736 | 0,000142564 | 0,000182520 |
| 1000 [°C] | 0,000107744 | 0,000143281 | 0,000212285 | 0,000303108 |
| 1100 [°C] | 0,002380464 | 0,002893364 | 0,003348937 | 0,005970653 |
| 1200 [°C] | 0,044487246 | 0,046893903 | 0,049590836 | 0,050945004 |

Tab. 41. Průměrné hodnoty skutečné střední plochy zrna $A_{\text{střední}}$ [mm²] pro materiál P24

| Teplota expozice | Délka výdrže na příslušné teplotě | | | |
|------------------|-----------------------------------|-------------|-------------|-------------|
| | 1800 [s] | 7200 [s] | 14400 [s] | 28800 [s] |
| 900 [°C] | 0,000310817 | 0,000446477 | 0,000688538 | 0,000809403 |
| 1000 [°C] | 0,001025921 | 0,001392782 | 0,001218708 | 0,003339684 |
| 1100 [°C] | 0,002893364 | 0,003471566 | 0,005538336 | 0,007942374 |
| 1200 [°C] | 0,032547768 | 0,039334789 | 0,046190606 | 0,054990250 |

Stejným postupem, který byl představen v kapitole 7.3.4., byly údaje z tabulek 38 až 41 zaneseny do grafů a pomocí získaných regresních přímek a jejich rovnic bylo možné stanovit konstanty úměrnosti K_T , charakteristické pro každou z použitých expozičních teplot. Kromě toho bylo možné z uvedených rovnic odhadnout hodnoty A_{T0} [mm²], interpretované jako střední plochy zrna, kterých bude dosaženo po aplikaci svařovacího cyklu s maximem

odpovídajícím hodnotě expoziční teploty. Grafy s regresními přímkami a jejich rovnicemi jsou pro materiály HR3C, TP347HFG, P92 a P24 uvedeny v příloze 3.16. Číselné hodnoty údajů K_T a A_{T0} jsou pro materiál HR3C uvedeny v tabulce 42, pro materiál TP347HFG v tabulce 43, pro materiál P92 v tabulce 44 a pro materiál P24 v tabulce 45. Dále jsou ve všech zmíněných tabulkách uvedeny hodnoty přirozeného logaritmu konstanty K_T a převrácené hodnoty příslušné expoziční teploty T^{-1} [K^{-1}].

Tab. 42. Číselné hodnoty údajů K_T , A_{T0} , $\ln K_T$ a T^{-1} pro materiál HR3C

| HR3C | Expoziční teplota | | | |
|-----------------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|
| | 900 [°C] | 1000 [°C] | 1100 [°C] | 1200 [°C] |
| K_T [$mm^2 \cdot s^{-1}$] | $2,4111 \cdot 10^{-8}$ | $8,4556 \cdot 10^{-8}$ | $9,9222 \cdot 10^{-8}$ | $1,2852 \cdot 10^{-7}$ |
| A_{T0} [mm^2] | 0,0040196 | 0,0042738 | 0,0051104 | 0,0054667 |
| $\ln K_T$ [$mm^2 \cdot s^{-1}$] | -17,5406 | -16,2859 | -16,1259 | -15,8672 |
| T^{-1} [K] | 0,0008525 | 0,0007855 | 0,000728 | 0,0006789 |

Tab. 43. Číselné hodnoty údajů K_T , A_{T0} , $\ln K_T$ a T^{-1} pro materiál TP347HFG

| TP347HFG | Expoziční teplota | | | |
|-----------------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|
| | 900 [°C] | 1000 [°C] | 1100 [°C] | 1200 [°C] |
| K_T [$mm^2 \cdot s^{-1}$] | $1,2222 \cdot 10^{-9}$ | $7,8519 \cdot 10^{-9}$ | $1,4481 \cdot 10^{-8}$ | $2,9370 \cdot 10^{-8}$ |
| A_{T0} [mm^2] | 0,0005618 | 0,0005949 | 0,0006719 | 0,0006911 |
| $\ln K_T$ [$mm^2 \cdot s^{-1}$] | -20,5226 | -18,6625 | -18,0504 | -17,3433 |
| T^{-1} [K] | 0,0008525 | 0,0007855 | 0,000728 | 0,0006789 |

Tab. 44. Číselné hodnoty údajů K_T , A_{T0} , $\ln K_T$ a T^{-1} pro materiál P92

| P92 | Expoziční teplota | | | |
|-----------------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|
| | 900 [°C] | 1000 [°C] | 1100 [°C] | 1200 [°C] |
| K_T [$mm^2 \cdot s^{-1}$] | $4,0370 \cdot 10^{-9}$ | $7,3333 \cdot 10^{-9}$ | $1,3367 \cdot 10^{-7}$ | $2,3015 \cdot 10^{-7}$ |
| A_{T0} [mm^2] | 0,0000707 | 0,0000958 | 0,0019054 | 0,0449757 |
| $\ln K_T$ [$mm^2 \cdot s^{-1}$] | -19,3278 | -18,7308 | -15,8279 | -15,2845 |
| T^{-1} [K] | 0,0008525 | 0,0007855 | 0,000728 | 0,0006789 |

Tab. 45. Číselné hodnoty údajů K_T , A_{T0} , $\ln K_T$ a T^{-1} pro materiál P24

| P24 | Expoziční teplota | | | |
|-----------------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|
| | 900 [°C] | 1000 [°C] | 1100 [°C] | 1200 [°C] |
| K_T [$mm^2 \cdot s^{-1}$] | $1,8407 \cdot 10^{-8}$ | $8,4185 \cdot 10^{-8}$ | $1,9411 \cdot 10^{-7}$ | $8,0889 \cdot 10^{-7}$ |
| A_{T0} [mm^2] | 0,0003239 | 0,0006455 | 0,0024276 | 0,03271 |
| $\ln K_T$ [$mm^2 \cdot s^{-1}$] | -17,8105 | -16,2903 | -15,4548 | -14,0276 |
| T^{-1} [K] | 0,0008525 | 0,0007855 | 0,000728 | 0,0006789 |

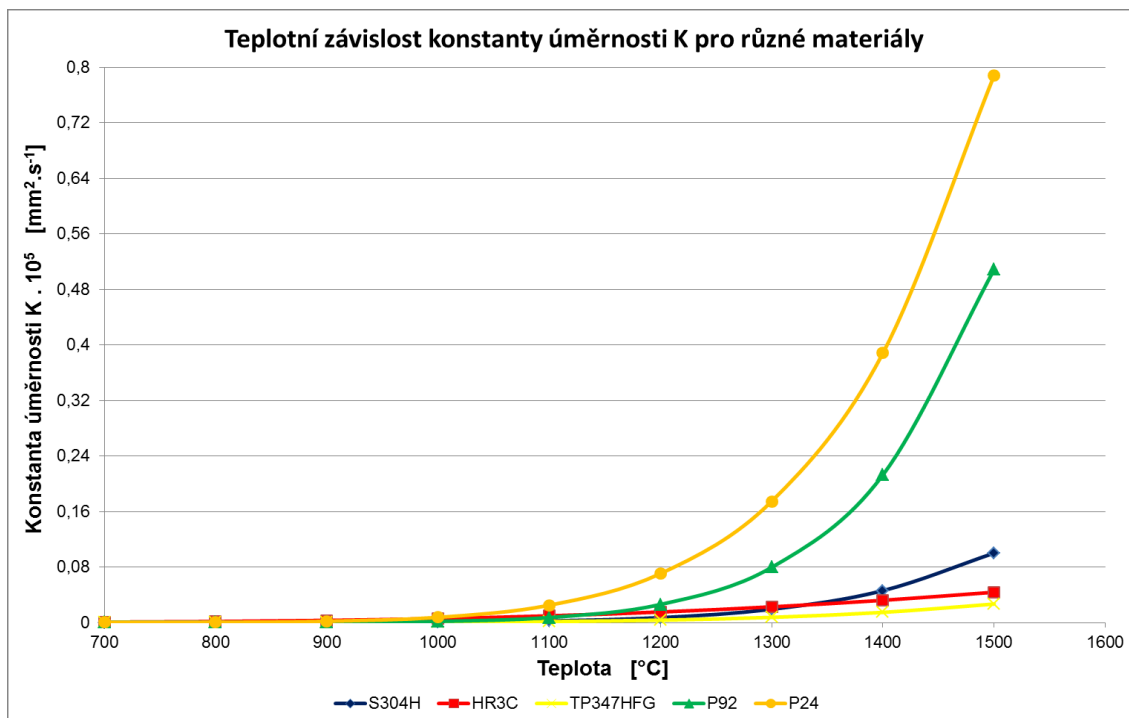
Údaje $\ln K_T$ a T^{-1} uvedené v tabulkách 42 až 45 byly pro jednotlivé materiály, ve shodě s postupy na obrázcích 28 a 31, zaneseny do grafů. Díky tomu mohly být vytvořeny regresní

přímky a jejich rovnice. Grafy s příslušnými regresními přímkami a jejich rovnicemi jsou uvedeny v příloze 3.17. Pro každý materiál tak bylo možné z rovnice regresní přímky, stanovit koeficienty B a C v souladu s rovnicí (43) a pomocí rovnic (44) a (45) také hodnoty aktivační energie Q a konstanty K_0 . Získané údaje jsou pro materiály HR3C, TP347HFG, P92 a P24 uvedeny v tabulce 46.

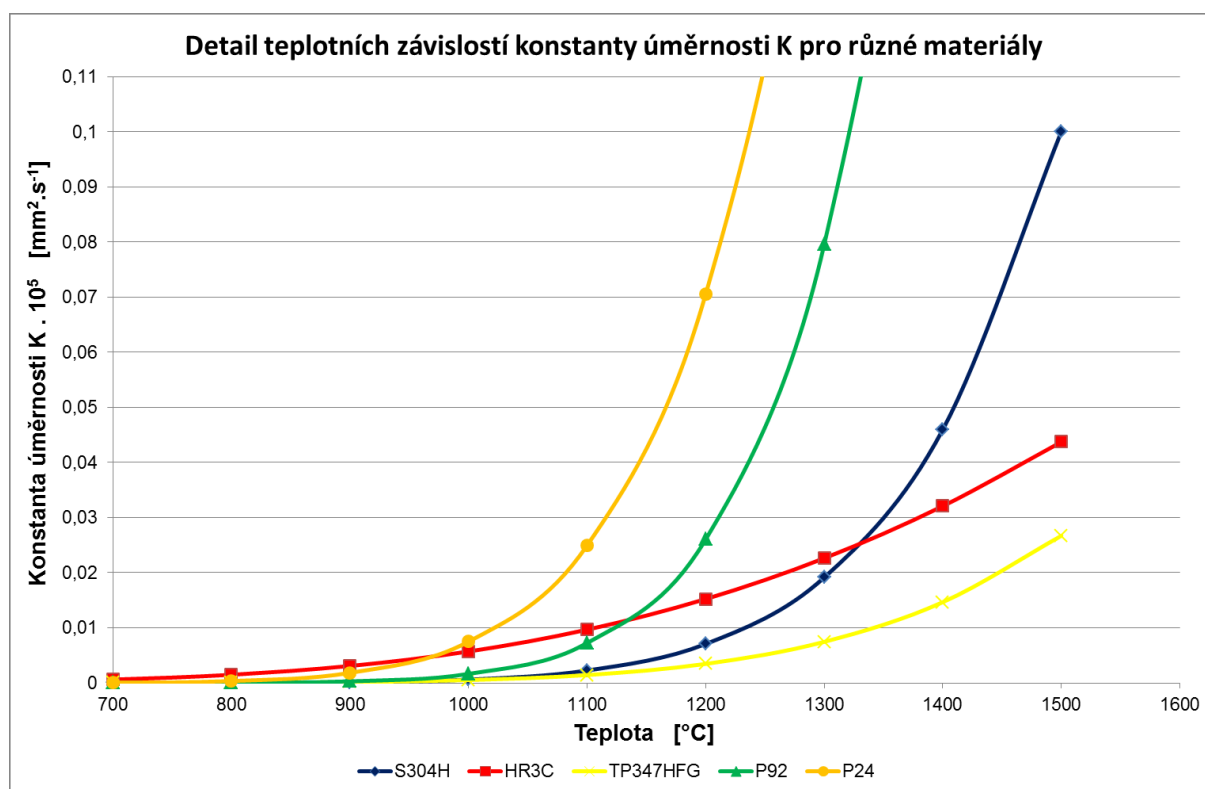
Tab. 46. Koeficienty B, C a hodnoty Q a K_0 pro oceli HR3C, TP347HFG, P92 a P24

| | HR3C | TP347HFG | P92 | P24 |
|--|------------------------|------------------------|----------|----------|
| konstanta B | -9186,7 | -17786,3 | -25871,1 | -21012,4 |
| konstanta C | -9,4609 | -5,1039 | 2,4031 | 0,1007 |
| Q [J.mol⁻¹] | 76382 | 147884 | 215104 | 174707 |
| K₀ [mm².s⁻¹] | 7,784.10 ⁻⁵ | 6,073.10 ⁻³ | 11,057 | 1,106 |

Díky získaným údajům (tab. 46.) je možné, v souladu s rovnicí (30) vygenerovat křivky kinetiky růstu zrna pro jednotlivé materiály, tak jak je ukázáno na obrázku 33. Tyto křivky mohou dát představu o předpokládané rychlosti růstu zrna při jednotlivých expozičních teplotách. Z obrázku je také možno odečíst, že nejrychleji budou růst zrna u materiálu P24, přestože hodnota jeho aktivační energie Q je uprostřed intervalu mezi zkoumanými materiály. Dále je také zřejmé, že u austenitických ocelí budou růst zrna při vysokých expozičních teplotách pomaleji, než u ocelí P92 a P24. Detailnější pohled na tvar jednotlivých křivek je ukázán na obrázku 34.



Obr. 33. Křivky kinetiky růstu zrna pro oceli S304H, HR3C, TP347HFG, P92 a P24 vygenerované simulačním programem a vynásobená hodnotou 10^5



Obr. 34. Detail křivek kinetiky růstu zrna pro oceli S304H, HR3C, TP347HFG, P92 a P24 vynásobený hodnotou 10^5

7.4. Simulace zhrubnutí zrna a jejich verifikace

Při zadání vstupních údajů (získaných popsány metodickými postupy) do simulačních výpočtů, reprezentovaných vzorci (32) a (33), bylo třeba vyřešit, jakou hodnotu proměnného koeficientu m do výpočtu zadat. Na základě rozboru uvedeného v kapitole 7.3.4. vyplynulo doporučení volit exponent $m = 2$ při simulacích dějů probíhajících při teplotách nad 1000°C a překračujících čas 100 sekund. Přitom ale platí, že s rostoucí teplotou expozice se zkracuje expoziční čas, po němž by měl být volen exponent $m = 2$.

Aby byl ukázán vliv volby exponentu m na výslednou přesnost simulace růstu zrna při dlouhodobých i krátkodobých výdržích na teplotách překračujících 900°C , byly provedeny simulace dějů odpovídající experimentům uvedeným v tabulce 27. Tyto simulace byly realizovány pro materiál S304H a byly v nich zahrnuty výpočty velikosti zrna s exponenty $m = 2$ a $m = 4$ pro hodnoty aktivační energie růstu zrna $Q = 191790 \text{ [J.mol}^{-1}\text{]}$ a konstanty $K_0 = 44,722 \cdot 10^{-2} \text{ [mm}^2\text{.s}^{-1}\text{]}$. Dále byly provedeny simulační výpočty pro postupy doporučované v uživatelských manuálech, tedy použití hodnoty exponentu $m = 4$, konstantu $K_0 = 0,4948 \cdot 10^{14} \text{ [mm}^4\text{.s}^{-1}\text{]}$ a poměr aktivační energie a plynové konstanty $Q/R = 74100 \text{ [K]}$, získaný experimentálně pro materiál S304H. V tabulce 47 je ukázáno porovnání výsledků jednotlivých simulací s experimentálně změřenými hodnotami velikosti zrna.

Tab. 47. Porovnání výsledků simulací s různými hodnotami m , Q a K_0 – materiál S304H

| S304H | Střední velikost zrna $D_{\text{střední}}$ [mm] pro příslušné doby výdrže na expoziční teplotě | | | | |
|------------------------------|--|-----------------|-----------------|------------------|------------------|
| | 1 [s] | 1800 [s] | 7200 [s] | 14400 [s] | 28800 [s] |
| Experimet 900 [°C] | 0,02065 | 0,02063 | 0,02079 | 0,02126 | 0,02143 |
| Simulace S1 900 [°C] | 0,02044 | 0,02192 | 0,02344 | 0,02471 | 0,02649 |
| Simulace S2 900 [°C] | 0,02639 | 0,05943 | 0,07559 | 0,08603 | 0,09845 |
| Simulace S3 900 [°C] | 0,02086 | 0,02342 | 0,02468 | 0,02549 | 0,02645 |
| Experimet 1000 [°C] | 0,02051 | 0,02081 | 0,02178 | 0,02211 | 0,02396 |
| Simulace S1 1000 [°C] | 0,02048 | 0,02269 | 0,02571 | 0,02734 | 0,03159 |
| Simulace S2 1000 [°C] | 0,02922 | 0,06825 | 0,09327 | 0,10371 | 0,12618 |
| Simulace S3 1000 [°C] | 0,02197 | 0,03066 | 0,03491 | 0,03766 | 0,04093 |
| Experimet 1100 [°C] | 0,02678 | 0,02835 | 0,03093 | 0,03275 | 0,04113 |
| Simulace S1 1100 [°C] | 0,02055 | 0,02679 | 0,03316 | 0,03844 | 0,04591 |
| Simulace S2 1100 [°C] | 0,03266 | 0,100266 | 0,13335 | 0,15472 | 0,18013 |
| Simulace S3 1100 [°C] | 0,02488 | 0,04956 | 0,06164 | 0,06944 | 0,07872 |
| Experimet 1200 [°C] | 0,03169 | 0,03078 | 0,03971 | 0,04376 | 0,05114 |
| Simulace S1 1200 [°C] | 0,02067 | 0,03168 | 0,04196 | 0,04831 | 0,05961 |
| Simulace S2 1200 [°C] | 0,03671 | 0,12662 | 0,16723 | 0,18746 | 0,21842 |
| Simulace S3 1200 [°C] | 0,03144 | 0,09229 | 0,12207 | 0,14130 | 0,16418 |

Při simulaci S1 byly použity hodnoty $m = 2$; $Q = 191790 \text{ [J.mol}^{-1}\text{]}$; $K_0 = 44,722 \cdot 10^{-2} \text{ [mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}\text{]}$

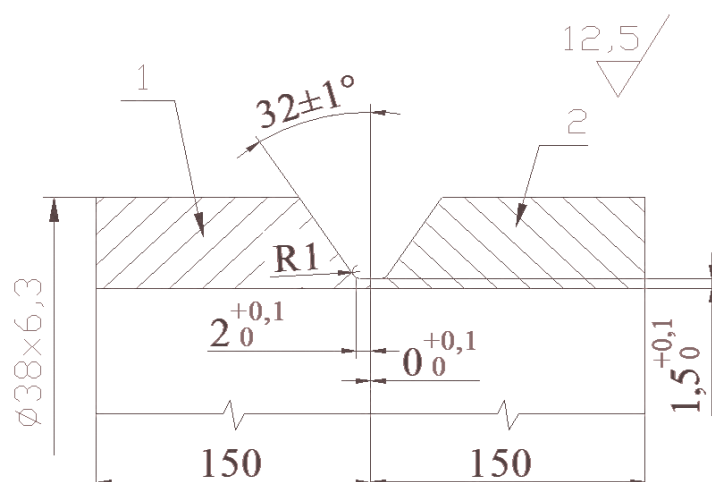
Při simulaci S2 byly použity hodnoty $m = 4$; $Q = 191790 \text{ [J.mol}^{-1}\text{]}$; $K_0 = 44,722 \cdot 10^{-2} \text{ [mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}\text{]}$

Při simulaci S3 byly použity hodnoty $m = 4$; $Q/R = 74100 \text{ [K]}$; $K_0 = 0,4948 \cdot 10^{14} \text{ [mm}^4 \cdot \text{s}^{-1}\text{]}$

Ze získaných výsledků je možné stanovit několik následujících předpokladů a doporučení:

- Při predikcích velikosti zrna u dějů probíhajících při teplotách nad 900°C a s výdržemi překračujícími 30 minut (pravděpodobně již u výdrží překračujících 120 sekund – viz. kapitola 7.3.4.) by měla být volena hodnota koeficientu $m = 2$ a vstupní data by měla být připravena dle metodiky odpovídající variantě S1.
- Variantu označenou v tabulce 47 jako S2 je možné použít pro simulace velikosti zrna pouze při aplikacích teplotních cyklů odpovídajících tavným metodám svařování. Tedy s výdržemi nepřekračujícími desítky sekund při teplotách nad 900°C. Díky rozpouštění karbidů a nitridů při vysokých teplotách by bylo vhodné zahrnout do výpočtu možnost automatické změny exponentu m v závislosti na okamžité teplotě.
- Při simulacích velikosti zrna po aplikaci teplotních cyklů odpovídajících tavným metodám svařování bylo největší shody dosaženo u varianty S3. Tato varianta je však zcela nevhodná pro simulace dlouhodobějších výdrží při teplotách nad 1000°C.
- Při stanovení velikosti zrna při svařovacích cyklech i dlouhodobých výdrží při teplotách nepřesahujících 900°C je možné s dostatečnou přesností použít obě varianty S1 a S3.

Pro posouzení vlivu vstupních údajů získaných popsány metodickými postupy na přesnost simulačních výpočtů velikosti zrna u průmyslově využívaných postupů svařování, byly provedeny experimenty svařování pro heterogenní svarové spoje. Jednalo se o vzájemné kombinace materiálů HR3C, S304H, TP347HFG s ocelí P92. Experimentální svary byly provedeny na trubce o průměru 38 a tloušťce stěny 6,3 mm. Pro svařování byla použita metoda 141 dle normy ISO 4063. Pro jednoznačné definování okrajových podmínek experimentu, je vhodné eliminovat vliv lidského faktoru. Proto bylo pro svařování použito programovatelné zařízení od firmy Polysoude s automatickou orbitální hlavou a podavačem drátu. Úpravu svarových ploch na trubkách ukazuje obrázek 35.



Obr. 35. Příprava svarových ploch na trubkách pro různé kombinace materiálů

Vlastní svařování bylo realizováno ve firmě Vítkovice Power Engineering, a.s. Celkově byly pro svařování použity dva typy přídavných materiálů průměru 0,8 mm od firmy Böhler Uddeholm. Jednalo se o přídavný materiál UTP A 6170 Co použitý pro svařování kombinace ocelí TP347HFG a P92 a dále o přídavný materiál Thermanit 617 použitý pro vzájemné kombinace materiálů HR3C a S304H s materiálem P92. Chemické složení obou přídavných materiálů je uvedeno v tabulce 48. [149]

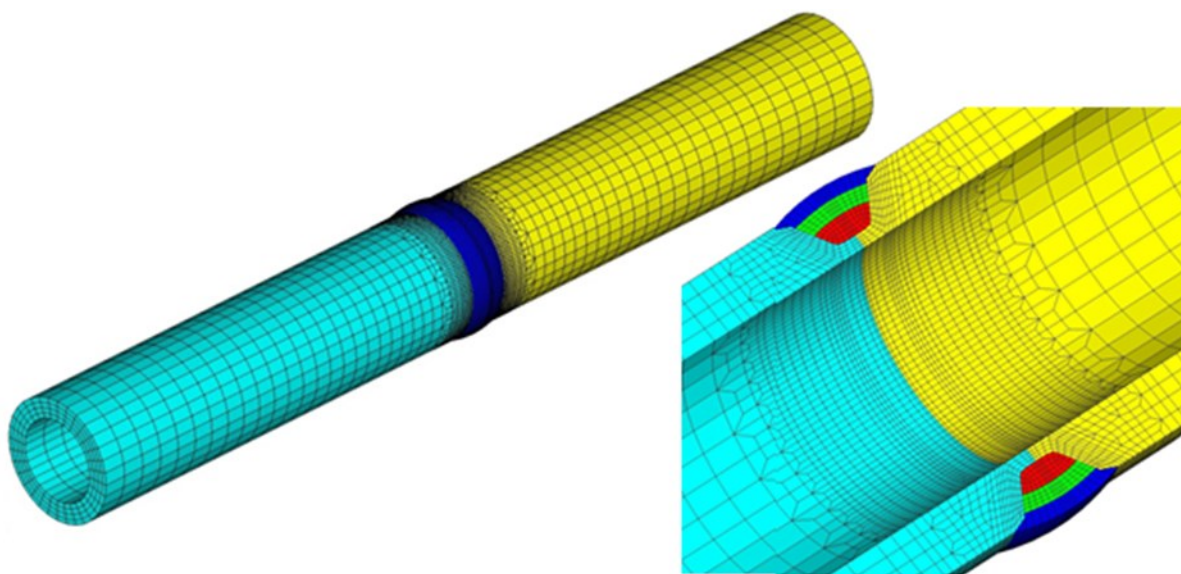
Tab. 48. Chemické složení použitých přídavných materiálů v hm. % [149]

| | C | Si | Mn | Mo | Cr | Ni | Ti | Fe | Al | Co |
|----------------------|------|-----|-----|-----|------|------|-----|-----|-----|------|
| Thermanit 617 | 0,05 | 0,1 | 0,1 | 9,0 | 21,5 | Rest | 0,5 | 1,0 | 1,0 | 11,0 |
| UTP A 6170 Co | 0,06 | 0,3 | - | 8,5 | 22,0 | Rest | 0,4 | 1,0 | 1,0 | 11,5 |

Svařovalo se celkově na tři vrstvy s předehřevem 180°C a byla hlídána interpass teplota 290°C. Protože jsou při orbitálním svařování zahrnuty všechny svařovací polohy, musely být procesní parametry v průběhu svařování uzpůsobeny aktuální poloze hořáku, podle předem odzkoušeného a odladěného programu. Vnesené teplo se tak v závislosti na poloze svařování a typu svarové housenky (kořenová, výplňová, krycí) pohybovalo v rozmezí od 11

do 19 kJ.cm^{-1} [149]. Počátky jednotlivých housenek byly vůči sobě vzájemně posunuty o 120° a také se pro každou housenku měnil směr svařování. Navíc po dokončení orbitaly 360° došlo u každé z housenek k přejetí hořáku o 10 mm, aby byl materiál nataven a vyplněn po celém svařovaném obvodu.

Vzorky pro makrovýbrusy jednotlivých svarů byly odebrány mimo místa počátků a konců jednotlivých housenek. Pomocí nich mohla být definována geometrie jednotlivých svarových housenek a také vytvořen prostorový model v programu Sysweld, tak jak je ukázáno na obrázku 36. Modrá, zelená a červená barva neznačí na obrázku 36 skutečnou geometrii jednotlivých svarových housenek, ale pouze oblast přídavného materiálu, který vstupoval do výpočtu teplotních polí již ve formě taveniny (jak již bylo vysvětleno v kapitole 3.4.).



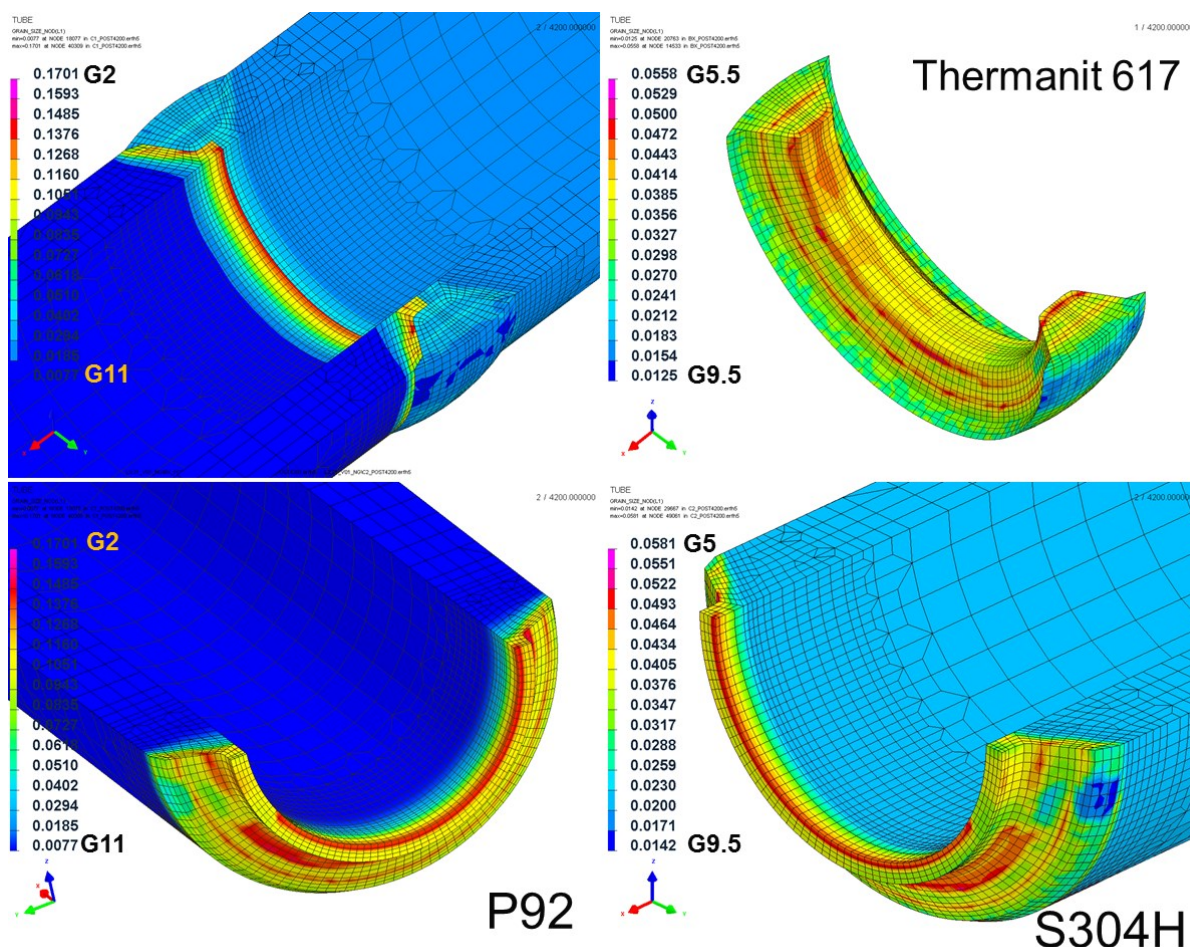
Obr. 36. Prostorový model pro výpočet teplotních polí při svařování a velikosti zrna v TOO

Nestacionární teplotní pole vznikající od jednotlivých svarových housenek byla, na základě vstupních údajů o svařování, počítána numericky s využitím Goldakova dvouelipsoidního modelu zdroje tepla. Výsledná teplotní pole byla použita společně s křivkami kinetiky růstu zrna pro materiály S304H a P92 jako vstupní údaje k numerickým výpočtům zhrubnutí zrna v tepelně ovlivněné oblasti svarů.

Na základě předpokladů vyplývajících z výsledků simulací uvedených v tabulce 47 byla pro simulace růstu zrna přednostně použita varianta výpočtu s hodnotou exponentu $m = 4$, hodnotou konstanty $K_0 = 0,4948 \cdot 10^{14} [\text{mm}^4 \cdot \text{s}^{-1}]$, poměrem aktivační energie a plynové konstanty pro materiál S304H $Q/R = 74100 [\text{K}]$ a poměrem aktivační energie a plynové konstanty pro materiál P92 $Q/R = 70200 [\text{K}]$ (viz příloha 3.1).

Výsledky z numerických simulací lze prezentovat graficky, nebo číselně. Grafická forma je ukázána na obrázku 37. S její pomocí je možné zobrazit libovolný řez a libovolné místo modelu pro jeden konkrétní výpočtový čas. Tento způsob zobrazení dat je ideální pro

detekování míst, která jsou potenciálními kritickými místy při zvoleném postupu svařování. Díky tomu je pak možné postup svařování variabilně upravovat tak, aby tato místa byla eliminována. Naopak vyjádření veličiny číselnou hodnotou umožňuje porovnání dosažené hodnoty s reálnými výsledky pro přesně daný časový okamžik. Tímto porovnáním může být stanovena přesnost simulačně dosažených výsledků a také míra aplikovatelnosti vytvořených modelů pro další simulované stavy a úlohy. Na obrázku 37 jsou ukázány grafické výsledky zhrubnutí zrna v TOO pro heterogenní spoj materiálů S304H – P92, svařovaných s přídavným materiálem Thermanit 617.

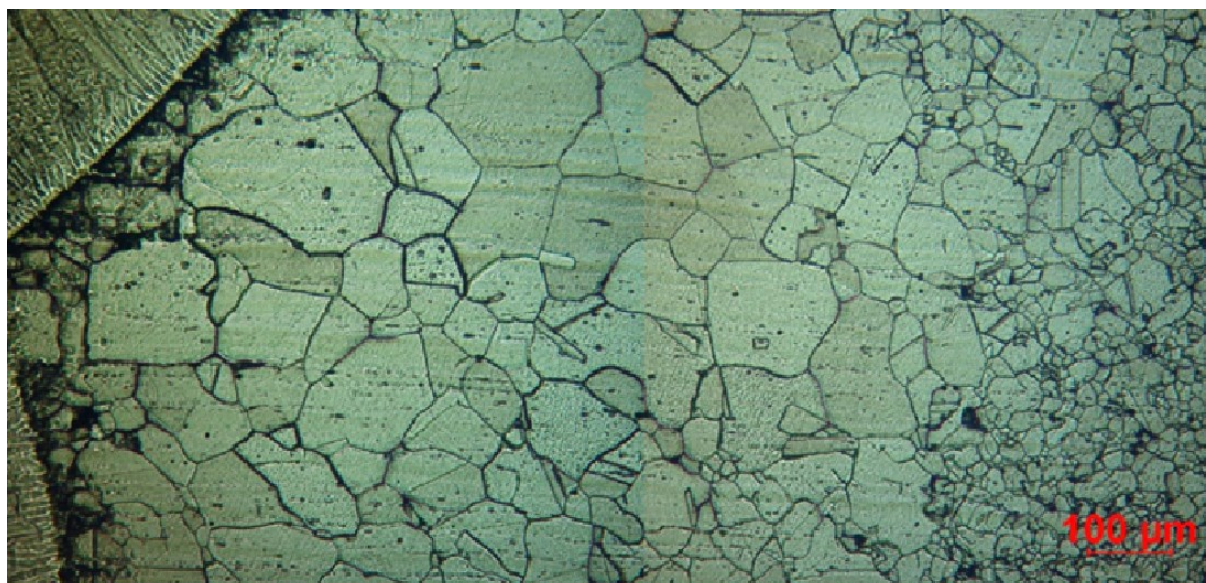


Obr. 37. Grafické výsledky zhrubnutí zrna v TOO pro kombinaci materiálů S304H – P92

Na obrázku 38 je pak ukázáno zhrubnutí zrna v TOO reálného svaru v části patřící austenitické oceli S304H. Obrázek je složen z více fotografií pořízených na optickém mikroskopu tak, aby byla zobrazena celá oblast od hranice ztavení až po základní materiál. Díky tomu může být uvedená oblast využita k porovnání výsledků zhrubnutí zrna u reálného svaru s výsledky získanými pomocí numerických simulací.

Z obrázku 38 jsou však zřejmé další obtíže pro plánované porovnání výsledků. Protože je třeba porovnávat velikost zrna v určitých přesně definovaných vzdálenostech od hranice

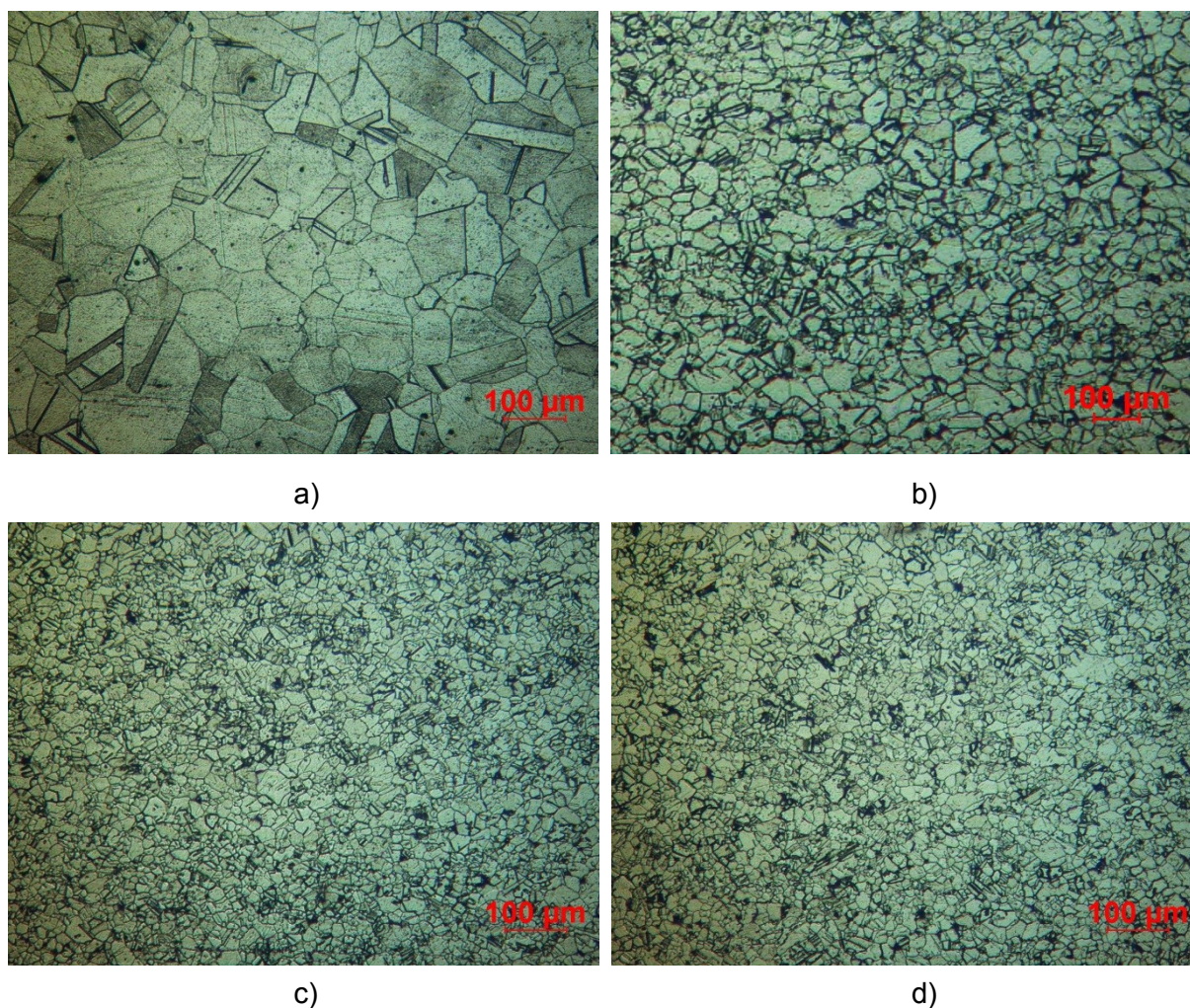
ztavení, není možné použít pro stanovení velikosti zrna v TOO svarů planimetrickou metodu. Dílčím řešením může být využití podstaty lineární průsečíkové metody, kdy by k vyhodnocení byly použity úsečky ve tvaru ekvidistant k hranici natavené oblasti umístěné v přesně definovaných vzdálenostech od hranice ztavení. Jak však bylo ukázáno v kapitole 7.3.3. i tato metoda má svá omezení a nepřesnosti.



Obr. 38. Velikost zrna v TOO u reálného svaru (od hranice ztavení po základní materiál)

Ideálním způsobem verifikace numericky získaných výsledků je využití porovnávacích vzorků vytvořených na teplotně napěťovém simulátoru. Pomocí tohoto přístroje je možné na příslušný vzorek aplikovat teplotní cyklus odpovídající příslušnému místu v tepelně ovlivněné oblasti. Údaje pro teplotní cykly simulátoru mohou být použity z termočlánků použitých při vlastním experimentu, nebo mohou být vygenerovány pro dané místo TOO přímo simulačním programem. V takovém případě je aplikovaný teplotní cyklus zcela identický s teplotním cyklem použitým při numerické simulaci. Díky tomu lze přesně kvantifikovat odchylky výsledků numerických simulací zhrubnutí zrna od reálných dějů.

Vzorky podrobené teplotním cyklům jsou při vyhodnocení rozřezány a metalograficky zpracovány v místě odpovídajícím řídicímu termočlánku teplotně napěťového simulátoru. K dispozici je tak dostatečně velká plocha umožňující vyhodnocení velikosti zrna pomocí planimetrické metody a přitom odpovídající konkrétnímu definovanému místu v tepelně ovlivněné oblasti. Na obrázku 39 jsou ukázány struktury materiálu S304H (při 100x zvětšení) získané z teplotně napěťového simulátoru a odpovídající vzdálenostem 0,5; 1,5; 2,5 a 3,5 mm od hranice ztavení. Teplotní cykly byly převzaty ze simulačních výpočtů. Každý z verifikačních vzorků byl proto podroben trojnásobnému teplotnímu cyklu, odpovídajícímu tepelnému ovlivnění od jednotlivých housenek v příslušném místě TOO.



Obr. 39. Struktury materiálu S304H na vzorcích z teplotně napěťového simulátoru odpovídající vzdálenostem od hranice ztavení a) 0,5 mm; b) 1,5 mm; c) 2,5 mm; d) 3,5 mm.

Stejným způsobem byly ověřeny také výsledky simulačních výpočtů pro ostatní materiály HR3C, P92 a TP347HFG. V tabulce 49 je provedeno výsledné porovnání velikostí zrna v TOO pro reálné svary a pro simulační výpočty v definovaných bodech vzdálených od hranice ztavení 0,5; 1; 1,5; 2; 2,5; 3 a 5 mm.

V případě dostatečné shody mezi realitou a simulačním výpočtem je možné získané křivky kinetiky růstu zrna a hodnoty variabilního exponentu m aplikovat i na další typy svarových spojů nebo metody svařování a to v mnohovariantním řešení umožňujícím optimalizaci navržených technologických postupů. Verifikace výsledků se pak již provádí v minimálním rozsahu pouze pro vybrané finální řešení.

Porovnávání velikosti zrna uvedené v tabulce 49 odpovídají u všech materiálů rovině definované rozhraním mezi první a druhou svarovou housenkou, tedy místu zobrazenému na obrázku 38.

Tab. 49. Výsledné porovnání velikostí zrna v TOO pro reálné svary a pro simulační výpočty pro materiály S304H, HR3C, TP347HFG a P92.

| | | Vzdálenost od hranice ztavení | | | | | | |
|----------|--|-------------------------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| | | 0.5 | 1.0 | 1.5 | 2.0 | 2.5 | 3.0 | 5.0 |
| S304H | D_{střední} [mm] - experiment | 0.0834 | 0.0638 | 0.0272 | 0.0251 | 0.0209 | 0.0193 | 0,0207 |
| | Počet zrn na mm² – exper. | 144 | 246 | 1352 | 1587 | 2289 | 2685 | 2334 |
| | Číslo vel. zrna G – exper. | G4 | G5 | G7 | G8 | G8 | G8 | G8 |
| | D_{střední} [mm] - simulace | 0.0721 | 0.0579 | 0.0296 | 0.0243 | 0.0204 | 0.0204 | 0.0204 |
| | Počet zrn na mm² – sim. | 192 | 298 | 1141 | 1693 | 2403 | 2403 | 2403 |
| | Číslo vel. zrna G – sim. | G4-5 | G5 | G7 | G8 | G8 | G8 | G8 |
| HR3C | D_{střední} [mm] - experiment | 0,0923 | 0,0851 | 0,0796 | 0,0708 | 0,0649 | 0,0652 | 0,0657 |
| | Počet zrn na mm² – exper. | 115 | 138 | 158 | 199 | 237 | 235 | 232 |
| | Číslo vel. zrna G – exper. | G4 | G4 | G4 | G5 | G5 | G5 | G5 |
| | D_{střední} [mm] - simulace | 0,0887 | 0,0814 | 0,0742 | 0,0691 | 0,018 | 0,0607 | 0,0607 |
| | Počet zrn na mm² – sim. | 127 | 151 | 181 | 209 | 262 | 271 | 271 |
| | Číslo vel. zrna G – sim. | G4 | G4 | G4 | G5 | G5 | G5 | G5 |
| TP347HFG | D_{střední} [mm] - experiment | 0,0778 | 0,0651 | 0,0287 | 0,0253 | 0,0229 | 0,0241 | 0,0238 |
| | Počet zrn na mm² – exper. | 165 | 236 | 1214 | 1562 | 1907 | 1722 | 1765 |
| | Číslo vel. zrna G – exper. | G4 | G5 | G7 | G8 | G8 | G8 | G8 |
| | D_{střední} [mm] - simulace | 0,0704 | 0,0591 | 0,0302 | 0,0266 | 0,0239 | 0,0235 | 0,0235 |
| | Počet zrn na mm² – sim. | 202 | 286 | 1096 | 1413 | 1751 | 1811 | 1811 |
| | Číslo vel. zrna G – sim. | G5 | G5 | G7 | G7 | G8 | G8 | G8 |
| P92 | D_{střední} [mm] - experiment | 0,0964 | 0,0781 | 0,0617 | 0,0439 | 0,0211 | 0,0098 | 0,0076 |
| | Počet zrn na mm² – exper. | 108 | 164 | 263 | 519 | 2249 | 10412 | 17313 |
| | Číslo vel. zrna G – exper. | G4 | G4 | G5 | G6 | G8 | G10 | G11 |
| | D_{střední} [mm] - simulace | 0,1046 | 0,0932 | 0,0743 | 0,0472 | 0,0147 | 0,0077 | 0,0077 |
| | Počet zrn na mm² – sim. | 91 | 115 | 181 | 449 | 4628 | 16866 | 16866 |
| | Číslo vel. zrna G – sim. | G3 | G4 | G4 | G6 | G9 | G11 | G11 |

POZNÁMKA: Pro rychlé porovnání výsledků simulací a reálných experimentů je nejvhodnější použít počet zrn na 1 mm²

7.5. Diskuze dosažených výsledků při simulacích velikosti austenitického zrna

Hlavním cílem této části práce bylo ukázat způsob provádění numerických výpočtů velikosti zrna při simulacích svařování a tepelného zpracování pomocí komerčně využívaných programů. Identifikovat a definovat vstupní údaje nezbytné pro tento typ simulací, popsat způsob jejich stanovení a definovat oblasti jejich aplikovatelnosti.

K simulacím růstu austenitického zrna je dnes téměř výhradně využívána metoda Monte Carlo s Pottsovým zobecněním. Většina běžných simulačních programů využívá při výpočtu,

ve shodě s rovnicemi (28) až (30), pouze hodnotu aktivační energie Q [$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$] (případně poměr Q/R) a hodnotu materiálové konstanty K_0 [$\text{mm}^m\cdot\text{s}^{-1}$], závislé na způsobu růstu zrna vyjádřené hodnotou variabilního exponentu m . Protože je stanovení uvedených veličin finančně i experimentálně náročné, většina materiálových databází uvedené hodnoty neobsahuje. Přitom je hodnota aktivační energie využívána nejen při simulacích velikosti austenitického zrna, ale také například při simulacích popouštění.

Základními proměnnými definovanými uživatelem při numerickém výpočtu velikosti austenitického zrna jsou počáteční velikost zrna D_0 [mm], hodnota variabilního exponentu m [-] a hodnoty aktivační energie Q [$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$] a materiálové konstanty K_0 [$\text{mm}^m\cdot\text{s}^{-1}$]. Poslední dvě veličiny jsou ve shodě s rovnicí (30) využity ke stanovení teplotní závislosti konstanty úměrnosti K [$\text{mm}^2\cdot\text{s}^{-1}$], definující přírůstek plochy zrna za 1 sekundu při dané expoziční teplotě T [K].

Z uvedených proměnných lze však jednoduše stanovit pouze počáteční velikost zrna D_0 . Pro ostatní veličiny potřebné při simulacích svařování a tepelného zpracování neexistuje v současnosti ucelený metodický postup definující způsob jejich stanovení. Proto jsou pro uvedený typ simulací velmi často využívány postupy doporučené uživatelskými manuály, spočívající v použití hodnot exponentu $m = 4$, konstanty $K_0 = 0,4948\cdot 10^{14}$ [$\text{mm}^4\cdot\text{s}^{-1}$] a poměru aktivační energie a plynové konstanty v rozmezí hodnot $Q/R = 65000$ až 78000 [K]. Jak však bylo uvedeno v kapitole 7.4. a tabulce 47, uvedený postup dává uspokojivé výsledky pouze při simulacích velikosti zrna v tepelně ovlivněné oblasti svarů. Tedy při použití teplotních cyklů, u nichž celková výdrž nad teplotou 900°C nepřekročí 120 sekund. Navíc je třeba dostatečně přesně stanovit poměr Q/R . K tomu lze použít zjednodušený metodický postup stanovení poměru Q/R , vysvětlený a popsáný pro materiál S304H v první části kapitoly 7.3.4. a na obrázcích 25 a 26.

Nevýhodou uvedeného postupu je možnost optimalizovat poměr Q/R pouze pro jednu expoziční teplotu. Jsou-li při experimentech vzorky exponovány při různých expozičních teplotách, uvedeným postupem je získáno více poměrů Q/R . Do výpočtu je však možné zadat pouze jedinou takovouto hodnotu. Zpravidla to bývá průměrná hodnota stanovená ze všech získaných poměrů Q/R , případně hodnota poměru dosažená při maximální teplotě. Z uvedených poznatků je zřejmý důvod zvyšující se nepřesnosti simulovaných výsledků s rostoucí dobou výdrže na expoziční teplotě.

Pomocí druhého metodického postupu, vysvětleného a popsáného ve druhé části kapitoly 7.3.4. je možné pro příslušný materiál stanovit pouze jedinou hodnotu aktivační energie Q , případně poměru Q/R . Kromě toho lze uvedeným postupem získat zároveň také materiálovou konstantu K_0 . Tento postup navíc dovoluje do výpočtu zahrnout také způsob růstu zrna charakteristický pro daný materiál a vyjádřený exponentem m . Exponent lze volit v závislosti na způsobu růstu zrna a může nabývat hodnot od 2 do 5 [33].

Jak však již bylo ukázáno (obr. 24), s rostoucí teplotou a dobou expozice dochází k postupnému rozpouštění karbidů a nitridů zpevňujících zrna a tedy i ke snížení Zenerových sil. Převládajícím mechanismem růstu zrn se tak stává difúze a hodnota exponentu m je pak volena $m = 2$. To se týká zejména dějů probíhajících při teplotách nad 900°C , s výdržemi překračujícími 30 minut, případně dějů, kdy je vzorek ohříván velmi pomalu na vysoké expoziční teploty.

Díky experimentální části se podařilo navrhnout, popsat a ověřit zjednodušený metodický postup experimentálního stanovení poměru Q/R pro numerické simulace velikosti zrna s hodnotami exponentu m a konstanty K_0 doporučenými v uživatelských manuálech. Dále pak upravit metodický postup stanovení velikosti zrna doposud užívaný při objemovém tváření [33] a aplikovat jej pro potřeby simulací svařování a tepelného zpracování. Oba metodické postupy byly aplikovány na materiály S304H, HR3C, TP347HFG, P24 a P92. Pro všechny materiály se tak podařilo získat hodnoty aktivační energie Q , případně poměru Q/R a hodnoty materiálové konstanty K_0 . Díky tomu mohla být pro všechny materiály vygenerována teplotní závislost konstanty úměrnosti K , známá také jako křivka kinetiky růstu zrna a nezbytná pro simulace růstu zrna pomocí komerčních simulačních programů.

Benefitem z hlediska výuky je podrobný popis možných způsobů vyhodnocení velikosti zrna, včetně definování výhod, nevýhod a oblasti aplikovatelnosti jednotlivých způsobů vyhodnocení. Nad rámec původně zamýšleného rozsahu kapitoly byla ještě provedena analýza vlivu množství vstupních dat a intervalu teplot při nichž byla data získána na hodnoty konstanty úměrnosti K .

Na základě provedených experimentů a analýz lze proto formulovat následující doporučení:

- Při stanovení vstupních veličin numerických simulací růstu zrn je vhodné vycházet z experimentálně výsledků velikostí zrn, získaných při alespoň třech expozičních teplotách a třech různých výdržích na dané teplotě.
- Použité expoziční teploty je vhodné volit v intervalu 1000 až 1400°C , přičemž rozdíl mezi jednotlivými teplotami by měl být alespoň 100°C . Zahnutí vyšších teplot je vhodné zejména při simulacích tavného svařování. Nicméně interval 1000 až 1200°C experimentálně dosažitelný většinou konvenční přístrojů je dostačující pro většinu typů simulací růstu zrna.
- Pro simulace růstu zrna v TOO svarů je nejlepších výsledků dosaženo při aplikaci postupů doporučených uživatelskými manuály, tedy exponentu $m = 4$, konstanty $K_0 = 0,4948 \cdot 10^{14} [\text{mm}^4 \cdot \text{s}^{-1}]$ a experimentálně stanoveného poměru Q/R .
- Při simulacích tepelného zpracování je vhodné vycházet z konstanty úměrnosti K , definované pomocí hodnot Q a K_0 , experimentálně stanovených pomocí metodického postupu.

- Pro stanovení velikosti zrna u svařovacích cyklů i dlouhodobých výdrží při teplotách nepřesahujících 900°C je možné s dostatečnou přesností použít obě popsané varianty simulačních výpočtů i oba metodické postupy stanovení vstupních údajů.

Z hlediska dosažených výsledků a realizovaných postupů se jako nejvýhodnější jeví varianta stanovení velikosti zrna pomocí konstant úměrnosti K_T dosažených při dané teplotě. Zařazením teplotní závislosti konstant úměrnosti K_T do rovnice (28) by umožnilo predikovat velikost zrna s vysokou přesností pro všechny typy aplikací a pro celý teplotní interval. Ručně provedené výpočty u materiálu S304H pro interval teplot 900 až 1350°C a expoziční časy 1 až 28800 sekund vykazovaly maximální odchylku od experimentálně zjištěných hodnot 6,2%. Bohužel v současnosti využívané matematické popisy neumožňují zadávat konstanty K_T ve formě teplotních závislostí. Navíc by bylo nezbytné získat konstanty K_T pro teplotní interval alespoň v rozmezí teplot 1000 až 1400°C.